

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
Departamento de Física Fundamental



TESIS DOCTORAL

**Medida de secciones eficaces de excitación por impacto de
electrones : aplicación a la molécula de nitrógeno, al helio y
al neon**

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR
PRESENTADA POR

María del Rosario Shaw Martos

DIRECTOR:

José Campos Gutierrez

Madrid, 2015

TP
1984.
038

María Rosario Shaw Martos



x-53-031802-4

MEDIDA DE SECCIONES EFICACES DE EXCITACION POR IMPACTO
DE ELECTRONES. APLICACION A LA MOLECULA DE NITROGENO,
AL HELIO Y AL NEON

Departamento de Física Fundamental
Facultad de Ciencias Físicas
Universidad Complutense de Madrid
1984



BIBLIOTECA

Colección Tesis Doctorales. Nº

38/84

© María del Rosario Shaw Martos
Edita e imprime la Editorial de la Universidad
Complutense de Madrid. Servicio de Reprografía
Noviciado, 3 Madrid-8
Madrid, 1984
Xerox 9200 XB 480
Depósito Legal: M-4038-1984

MEMORIA QUE PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR
EN CIENCIAS FÍSICAS, PRESENTA

MARIA SHAW MARTOS

MEDIDA DE SECCIONES EFICACES DE EXCITACION
POR IMPACTO DE ELECTRONES, APLICACION A LA
MOLECULA DE NITROGENO, AL HELIO Y AL NEON.

DIRECTOR: PROF. J. CAMPOS GUTIERREZ
CATEDRÁTICO DE FÍSICA ATÓ
MICA EXPERIMENTAL.

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
DEPT. DE FÍSICA FUNDAMENTAL

1981

*A mi marido y mis hijos que con
generosidad me han cedido el tiem-
po que debía dedicarles a ellos.*

AGRADECIMIENTOS

Esta tesis se ha realizado en el laboratorio de Física Atómica y Nuclear de la Facultad de Ciencias Físicas bajo la dirección del Prof. D. José Campos Gutierrez. Quiero expresarle mi más profundo agradecimiento por su constante ayuda, dirección y consejo a lo largo de innumerables conversaciones, durante la realización de este trabajo.

Quiero expresar también mi agradecimiento al Prof. D. Carlos Sánchez del Río, director del Departamento de Física Fundamental, por la hospitalidad que me ha brindado.

Deseo también que conste mi gratitud a M. José G. Borge por su valiosa ayuda en la realización de los programas de cálculo, a F. Arqueros que en las primeras fases de este trabajo me inició en la preparación de los experimentos, a todos los compañeros del Laboratorio por las numerosas discusiones y sugerencias así como por el espíritu y ambiente científico en que se ha desarrollado mi trabajo, y a Julia Cereceda por su cuidadosa mecanografía realizada con tanto interés y espíritu de colaboración.

I N D I C E

	<u>Página</u>
INTRODUCCION	1
I. DISPOSITIVOS Y METODOS DE MEDIDA DE SECCIONES EFICACES DE EXCITACION. PARAMETROS RELACIONADOS	
I.1. Método de medida de secciones eficaces de excitación	4
I.1.1. Descripción del método óptico	6
I.1.2. Dispositivo experimental.	9
1. Descripción general.	9
2. Cámara de colisión	10
3. Sistema óptico	12
4. Dispositivo electrónico.	13
5. Medida de la presión	13
I.2. Medida del valor absoluto de la sección eficaz de excitación.	19
I.2.1. Descripción general	19
I.2.2. Sección eficaz del nivel 5's del Helio.	22
I.2.3. Correcciones.	23
1. Cascadas radiativas.	23
2. Atrape radiativo	28
3. Población por colisiones	29

Página

I.2.4. Otras correcciones	32
1. Perfil instrumental	32
2. Eficiencia del sistema óptico	33
3. Efectos producidos por el campo eléctrico	38
I.2.5. Determinación de la desexcitación de un nivel atómico y molecular.	40
1. Método u dispositivo de medida.	41
2. Medida de la población por cascada a partir de la vida media.	43
I.3. Medida de intensidades relativas de transiciones moleculares	45
I.3.1. Descripción general.	45
I.3.2. Parámetros deducidos	48
I.3.3. Correcciones	51
II. RESULTADOS OBTENIDOS PARA LA MOLECULA DE NITROGENO . . .	53
II.1. Medidas realizadas en la molécula neutra: Segundo Sistema Positivo. Transición $C^3\pi u - B^3\pi g$. . .	56
II.1.1. Medida de intensidades relativas	56
1. Razones de ramificación	58
II.1.2. Medida de secciones eficaces de excitación	61
II.1.3. Discusión.	70

Página

II.2. Medidas realizadas en la molécula ionizada: Primer Sistema Negativo. Transición $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$. .	74
II.2.1. Intensidades relativas	74
1. Razones de ramificación	79
II.2.2. Medida de secciones eficaces de excitación	79
II.2.3. Discusión.	84
III. RESULTADOS OBTENIDOS PARA EL ATOMO DEL HELIO	
III.1. Medida de secciones eficaces en Helio.	86
III.2. Características de la línea 5's utilizada como patrón.	87
III.3. Medida de la sección eficaz del estado 4's. . .	91
III.3.1. Función de excitación del nivel 3'P .	93
III.4. Medida de secciones eficaces de estados triples	93
III.4.1. Estado 4^3S	93
1. Función de excitación.	93
2. Corrección por cascadas.	94
III.4.2. Estado 3^3P	100
1. Función de excitación.	101

	<u>Página</u>
2. Corrección por cascada	101
III.5. Discusión	111
IV. ESTUDIO EXPERIMENTAL Y TEORICO DEL NEON.	114
IV.1. Estructura del Neon.	115
IV.2. Resultados obtenidos para el Neon.	116
IV.2.1. Medida de la sección eficaz de excitación del nivel $3p' 1/2 _0$. (Paschen $2p_1$)	118
1. Corrección por cascadas	122
2. Resultados obtenidos.	122
IV.2.2. Medida de la sección eficaz de excitación del nivel $4p' 1/2 $ (Paschen $3p_1$)	124
1. Corrección por cascadas	128
2. Resultados obtenidos.	128
IV.3. Cálculo teórico de la sección eficaz de excitación para el átomo de Ne	134
IV.3.1. Colisiones inelásticas	134
IV.3.2. Aplicación al caso del Ne	139
CONCLUSIONES	154
BIBLIOGRAFIA	158

INTRODUCCION

El estudio de los procesos de colisión inelástica electrón-átomo y electrón-molécula es de gran interés en numerosas ramas de la Física. Desde el punto de vista experimental, estos procesos juegan un papel importante en la Física de la atmósfera y, por otra parte, son necesarios para explicar el funcionamiento de muchos lasers. También cobran la máxima importancia en lo concerniente a la física de plasmas.

Desde el punto de vista teórico, son numerosos los autores que han estudiado los procesos de colisión inelástica. Estos son complejos y es difícil hallar teóricamente un valor suficientemente aproximado de la sección eficaz. En el caso del He los cálculos son más sencillos y mediante la aproximación de Born se pueden obtener valores teóricos de razonable precisión, siempre que la energía de los electrones sea suficientemente alta.

En esta Memoria se presenta un estudio, fundamentalmente experimental, de la medida de secciones eficaces de excitación por impacto de electrones de niveles de diferentes átomos y moléculas (nitrógeno, Helio y Ne). El parámetro que determina precisamente el proceso de excitación por colisión con electrones es la sección eficaz. Su determinación experimental es en general difícil y su conocimiento es de evidente interés para el estudio de los procesos de excitación. De modo que aunque se trata de una materia clásica de experimentación en Física Atómica se conocen pocos resultados fiables para las secciones eficaces.

En el presente trabajo se han medido las secciones eficaces de excitación por el método óptico, el cual utiliza el hecho de que al excitar los átomos de un gas mediante un haz de electrones

de energía determinada, aparece luz correspondiente a la emisión de los átomos o moléculas en su desexcitación. La intensidad de dicha emisión depende de la sección eficaz de excitación y de procesos secundarios, como son las cascadas y poblaciones por colisiones.

Para medir la sección eficaz absoluta es necesario conocer con precisión la presión del gas en el recinto de colisión, la intensidad del haz de electrones que excita los átomos del gas y la eficiencia absoluta del sistema óptico. Principalmente este último punto es el que mayor dificultad presenta y el que necesita de mayor precisión.

Para evitar los errores que se cometen en el cálculo de la eficiencia absoluta, se utiliza un método diferente, consistente en comparar la intensidad luminosa de la línea en estudio con la emitida por el He en la transición $5'S - 2'P$ (4.438 \AA) a 200 eV . Esto se realiza siguiendo la línea de trabajo del laboratorio de Física Atómica y Nuclear que puso a punto anteriormente un sistema de medida de secciones eficaces por el método óptico.

De esta manera se toma como patrón la sección eficaz de excitación del nivel $5'S$ del He, y se comparan las intensidades luminosas, en idénticas condiciones, de dos transiciones diferentes.

El conocimiento de las intensidades relativas de los estados excitados permite conocer las probabilidades de transición que están relacionadas con las razones de ramificación y cuyo cálculo es necesario para determinar las secciones eficaces de excitación de un nivel.

En el caso de las moléculas las razones de ramificación pueden determinarse teóricamente a partir de los factores de Franck-Condon o por medio del conocimiento experimental de las intensidades relativas.

También es necesario obtener la curva de desexcitación del nivel para poder evaluar las posibles poblaciones indirectas. Esto se realiza por medio del análisis temporal del decrecimiento con el tiempo de la intensidad de las líneas en estudio.

Además del interés que pueda tener el conocimiento de las secciones eficaces de excitación por su aplicación a otras ramas de la Física, tiene un indudable interés para probar los métodos aproximados de cálculo y los distintos modelos teóricos.

Se ha considerado que este trabajo debe incluir un cálculo teórico de la sección eficaz de dos niveles del Ne utilizando aproximación de Born para poder juzgar sobre el papel que las diferentes aproximaciones juegan en el grado de precisión de los cálculos en gases nobles. Se han comparado los presentes valores con los cálculos realizados por Sharpton y col. utilizando métodos distintos de aproximación y también se comparan con los resultados experimentales realizados en este trabajo.

La presente Memoria se ha dividido en cuatro capítulos. En el primero se detalla el método y dispositivo experimental de medida de secciones eficaces de excitación, intensidades relativas y análisis temporal de la desexcitación. En el segundo se presentan los resultados experimentales obtenidos de las medidas de intensidades relativas, y secciones eficaces de excitación en dos Sistemas de bandas del nitrógeno. En el tercero se presentan los resultados de las medidas de secciones eficaces de excitación de algunos niveles del He. El cuarto capítulo está dividido en dos partes, la primera que presenta los resultados experimentales obtenidos en la medida de secciones eficaces de excitación de dos niveles del Neon y la segunda parte en donde se hace un cálculo teórico de las secciones eficaces de dichos niveles.

CAPITULO I

DISPOSITIVOS Y METODO DE MEDIDA DE SECCIONES
EFICACES DE EXCITACION. PARAMETROS RELACIONADOS

I.1.- METODO DE MEDIDA DE SECCIONES EFICACES DE EXCITACIÓN

Todos los métodos de medida utilizados para determinar la sección eficaz de excitación de átomos o moléculas por impacto de electrones se basan en la propia definición de sección eficaz de excitación.

Supongamos un haz de electrones que atraviesa un gas de átomos o moléculas cuya población N sufrirá colisiones por el choque con los electrones, produciendo transiciones a un estado excitado i .

Si el flujo de electrones por cm^2 y por seg es ϕ , la variación de la población en el nivel i , n_i con el tiempo, vendrá dada por la ecuación

$$\frac{dn_i}{dt} = \sigma_i N \phi \quad (I.1)$$

donde la constante de proporcionalidad σ_i cuyas dimensiones son de un área, se llama sección eficaz de excitación del nivel i .

Parece lógico por lo tanto que en todos los métodos utilizados se estudie la excitación producida en un gas o vapor, cuyos

átomos se encuentran en estado fundamental al dirigirle un haz colimado de electrones. Los métodos utilizados para ello son variados, pero hablaremos brevemente de los más importantes.

a) Un primer método es aquel en el cual la intensidad de luz de una línea excitada por el haz de electrones se utiliza para medir el proceso de excitación del nivel del que procede. La probabilidad de producir un fotón en una línea dada por átomo y por unidad de flujo de electrones, nos da la medida de la sección eficaz de excitación del fotón. En este método se considera que los átomos están aislados. Asimismo sólo es aplicable para estados de vida media corta. Este es el llamado método óptico.

b) Un segundo método consiste en la detección de los átomos excitados por expulsión de electrones de un metal que hace de blanco, al sufrir el impacto de un haz de átomos que van a chocar contra él. Los átomos se desexcitan al incidir sobre el blanco comunicando su energía de excitación a los electrones, que aumentan su energía cinética. Un campo eléctrico recoge los electrones y la corriente correspondiente da información sobre el número de los átomos excitados. Este método sólo sirve para átomos con vida media largas. Presenta el problema de la calibración de la eficiencia de colección y la de conversión de los átomos metaestables en el metal.

c) Un tercer método estudia las colisiones inelásticas electrón-átomo mediante la medida de la pérdida de energía de los electrones dispersados al atravesar un gas. El haz de electrones de energía determinada se hace incidir sobre un gas y se mide, con un ángulo fijo respecto al haz, la energía de los electrones dispersados mediante un analizador de energías. El mayor problema que presenta es la necesidad de obtener datos con un amplio margen angular así como de un gran rango de energías.

Muchos investigadores han trabajado con estos métodos cuyas aplicaciones y diseños son explicados en las referencias (1), (2), (3) y (4).

1.1.1.- Descripción del método óptico

El primer método, o método óptico es el utilizado por nosotros y a él nos referiremos más detalladamente.

Supongamos un gas con una población de N moléculas/cm³ en el estado fundamental. Por la colisión con un haz de electrones son excitados una cierta cantidad de ellos hasta un nivel i . Si ϕ es el flujo de electrones (en cm⁻²s⁻¹) que chocan con las N moléculas o átomos del gas, la velocidad del proceso o el número de interacciones habidas por cm³y.seg. será por definición

$$\frac{dn_i}{dt} = N\phi\sigma_i \quad (1-2)$$

siendo σ_i la sección eficaz de reacción o la probabilidad de formación de estados poblados en el nivel i .

La población n_i se puede desexcitar produciendo fotones (emisión luminosa) hasta un nivel j con una probabilidad de transición que llamaremos A_{ij} y con una vida media τ_i . La ecuación del proceso será ahora

$$\frac{dn_i}{dt} = N\phi\sigma_i - \frac{n_i}{\tau_i} \quad (1-3)$$

La intensidad luminosa producida en la transición del nivel i al j es de la forma $I_i = n_i A_{ij}$.

Al cabo de un tiempo que será mayor que la vida media de la transición habrá un equilibrio dado por la ecuación

$$n_i = N \phi \sigma_i \tau_i \quad (I-4)$$

Sustituyendo

$$I_i = N \phi \sigma_i \tau_i A_{ij} \quad (I-5)$$

La vida media τ_i del nivel i es inversamente proporcional a la suma de las probabilidades de transición que parten del nivel i , por su misma definición, es decir que

$$\tau_i = \frac{1}{\sum_j A_{ij}} \quad (I-6)$$

queda pues

$$I_i = N \phi \sigma_i \frac{A_{ij}}{\sum_j A_{ij}} \quad (I-7)$$

Resulta entonces que la intensidad luminosa producida en la desexcitación del nivel i es proporcional a la sección eficaz de excitación del nivel i ;

$$I_i = N \phi \sigma_{ij} \quad (I-8)$$

En donde llamamos a

$$\sigma_i \frac{A_{ij}}{\sum_j A_{ij}} = \sigma_{ij} = \text{sección eficaz parcial} \quad (I-9)$$

en ausencia de otros efectos secundarios que tengan lugar y que analizaremos posteriormente.

Conociendo la intensidad luminosa, la concentración de moléculas del gas y el flujo de electrones del haz puede conocerse la sección eficaz parcial.

El método de medida que se utiliza consiste en medir la "función de excitación del nivel" que es la variación de la señal

luminosa producida por la excitación de una línea dada, en función de la energía de los electrones. Midiendo la variación de la intensidad luminosa con dicha energía obtenemos como se llama comunmente la "función de excitación óptica".

En ausencia de otros efectos secundarios, que veremos más adelante, esta función de excitación óptica coincide con la función de excitación del nivel considerado.

El sistema más usado para excitar las moléculas del gas y producir una señal luminosa se hace por medio de un haz de electrones procedentes de un cátodo caliente que son acelerados hacia el ánodo o región de excitación con una determinada energía.

Una vez conocida la función de excitación óptica se puede medir el valor absoluto de la sección eficaz para una determinada energía de los electrones. De la ecuación (1.8) se puede calcular la sección eficaz parcial si se conocen N , I_l y ϕ . N es proporcional a la presión ($N = KP$) y ϕ puede conocerse por medio de la función de excitación. I_l que es la intensidad luminosa, ofrece ciertas dificultades pues necesita del conocimiento de la eficiencia absoluta de detección del sistema óptico.

El método de medida utilizado para conocer con exactitud la intensidad luminosa varía de unos autores a otros pero en todos ellos tiene que ir acompañada de una exhaustiva calibración del sistema óptico. Es necesario utilizar una lámpara de tungsteno calibrada, de radiación espectral conocida, o bien calcularla aplicando la ley de Planck siempre que pueda conocerse con exactitud la temperatura de color. También es necesario conocer exactamente los factores geométricos de los elementos que intervienen en el proceso.

Todas estas medidas suponen una serie de dificultades para conseguir una calibración precisa y es necesario realizarlas con mucho cuidado (1).

El método utilizado por nosotros, siendo más original, evita todo este proceso de calibrados y medidas. Consiste en comparar la intensidad de luz emitida por la transición del nivel en estudio, con la intensidad emitida en idénticas condiciones experimentales por una línea atómica del Helio. La sección eficaz de excitación de los niveles del He se conocen con exactitud por cálculos teóricos pues existen diversos métodos aproximados para su determinación y son numerosos los autores (5),(7) que los han calculado. Por este procedimiento se eliminan todos los errores geométricos ya que se toma como patrón solamente la sección eficaz de un nivel del He.

I.1.2.- *Dispositivo experimental*

I.1.2.1.- Descripción general

Para la medida de la función óptica de excitación se utiliza una cámara de colisión en donde un haz de electrones son acelerados y atraviesan el gas en estudio produciendo a su paso un haz luminoso. Mediante una ventana de cuarzo y una lente el haz es recogido y enfocado sobre la entrada del sistema óptico, que selecciona la línea atómica o bien la banda molecular en estudio y se determina su intensidad luminosa.

Un sistema de detección en fase permite determinar el ruido de fondo y medirlo separadamente. La presión se mantiene constante durante todo el periodo que dura la medida y los manómetros han sido calibrados en un dispositivo aparte para tener conocimiento exacto de la presión existente en el recinto.

Para determinar la función óptica de excitación se mide la variación de la intensidad luminosa al ir variando la energía de los electrones. Esta se controla por medio de la tensión de polarización del ánodo. El rango de energías a las que se ha trabajado ha sido desde el umbral de excitación hasta 400 eV .

Un monocromador selecciona la longitud de onda en estudio y un fotomultiplicador detecta fotones individuales.

1.1.2.2.- Cámara de colisión

La cámara de colisión, esférica, en acero inoxidable consta de:

- Un filamento de tungsteno toriado al 1% de 0.2 mm de espesor. Alrededor se colocó un anillo unido al polo negativo del filamento para evitar que se dispersen los electrones.
- Una reja aceleradora de electrones que es modulada aplicándole impulsos positivos.
- Un anillo central entre la reja y el ánodo, al mismo potencial que éste último. Se coloca para evitar la penetración de campo y conseguir un potencial uniforme en toda la región del ánodo.
- Un ánodo formado por un recinto en donde se produce la excitación y cuyo potencial se identifica con la energía de los electrones.

Los electrodos han sido recubiertos de una capa de grafito para que absorban la luz dispersa del filamento y disminuya la formación de electrones secundarios.

Este dispositivo experimental es semejante al utilizado en diversas experiencias realizadas en el laboratorio de Física Atómica y Nuclear de la Universidad Complutense.

En la figura (1) puede verse un esquema de la cámara de colisión.

El haz de electrones tiene un diámetro aproximado de 2 mm

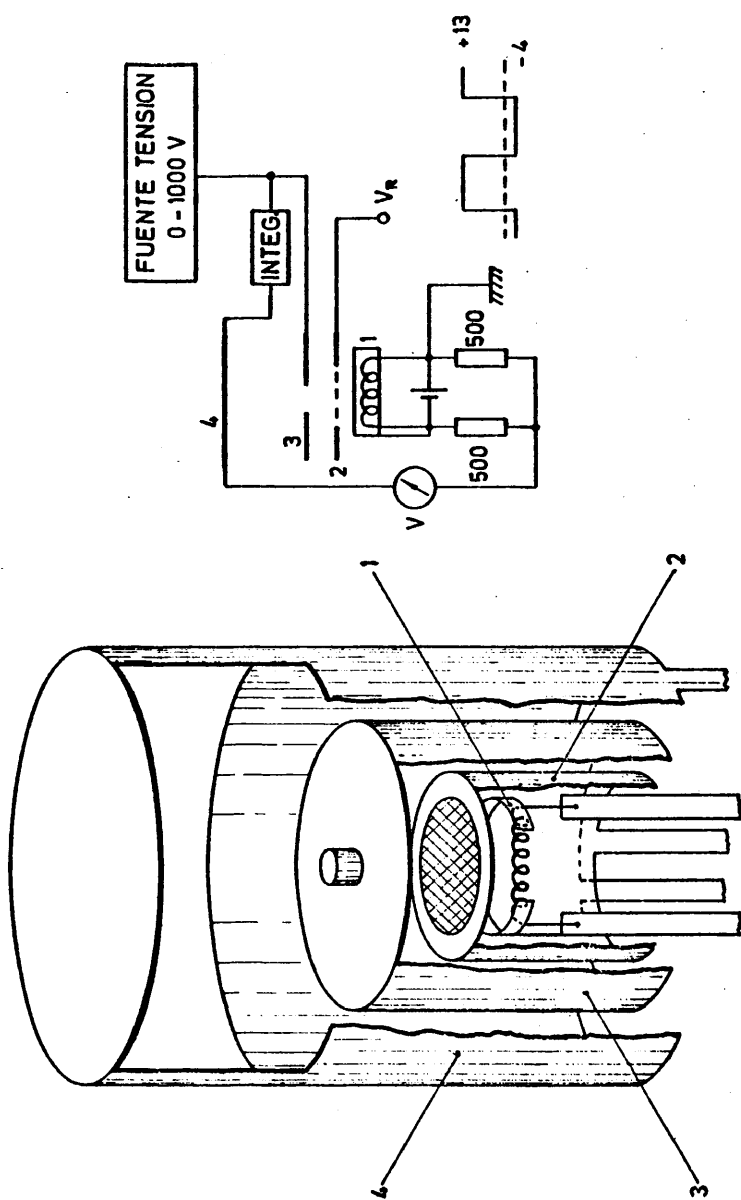


Fig. 1

y está enfocado con todos los demás electrodos de manera que llega a la parte posterior del ánodo aproximadamente en el centro. Esto puede comprobarse por la huella que deja en la pared.

La excitación de los átomos o moléculas del gas se consigue mediante un haz de electrones de baja energía. El haz luminoso se colocó perpendicular a la rendija de entrada del monocromador y su visión es posible por medio de una ventana de cuarzo colocada a tal efecto.

Para la alimentación del ánodo se ha utilizado una fuente de tensión variable que pasa a través de un circuito integrador cuya salida es proporcional a la carga total que la atraviesa.

1.1.2.3.- Sistema óptico

El sistema óptico está compuesto por una lente de cuarzo de 20 dioptrías (que puede moverse transversalmente) que enfoca el haz luminoso sobre la rendija del monocromador. Está colocada a media distancia entre la ventana de la cámara de colisión y la entrada del monocromador.

El monocromador, modelo Jarrell-Ash (82-410) de 0,25 metros tiene una red de 1.180 trazos/mm para la zona visible. Según los casos se han utilizado rendijas de 100 , 150 y 500 μ teniendo resoluciones de 3 Å , 4,5 Å y 15 Å respectivamente. Para la zona ultravioleta del espectro tienen una red de difracción de 2.360 trazos/mm con un poder de resolución de 2,2 Å a 7,5 Å dependiendo de las rendijas utilizadas. Como sistema detector se ha usado un fotomultiplicador 56 UVP sensible desde los 2.000 Å hasta 6.000 Å , con una ganancia a 2.200 Å de 10^8 , por lo que resulta apropiado para el recuento individual de fotones.

La salida del fotomultiplicador se llevó a un amplificador y

un discriminador de manera que los impulsos pueden almacenarse por un equipo de recuento. El discriminador de amplitudes es un circuito que da a la salida impulsos cuadrados de amplitud y anchura constantes e independientes de la forma que tengan los impulsos a la salida del fotomultiplicador.

En la Fig. (2) se muestra un diagrama bloque del sistema de medida de secciones eficaces.

1.1.2.4.- Dispositivo electrónico

Se utilizó un sistema de detección en fase para poder medir el ruido con precisión. Esto es muy importante sobre todo en el caso de líneas de intensidad débil, pues en caso contrario daría lugar a errores considerables en estos casos. El método consiste en modular el haz de electrones con una onda cuadrada de 1 KHz de frecuencia de manera que se extraen los electrones durante un semiperiodo y se interrumpe el paso de estos durante el siguiente. La respuesta del fotomultiplicador se lleva a dos equipos diferentes de recuento dependiendo de que la onda modulada se encuentre en un semiperiodo o en el otro. En una escala de recuento se mide por lo tanto la luz más el ruido de fondo y en la otra solamente el ruido.

Existe un integrador de carga colocado en el circuito de alimentación de ánodo cuya misión consiste en interrumpir la corriente cuando la carga total recogida en el ánodo es igual a una cierta cantidad que se ha fijado de antemano. Con esto se corrigen las variaciones de intensidad del haz y quedan normalizadas todas las medidas. En la Fig. (3) se muestra un esquema del circuito.

1.1.2.5.- Medida de la presión

El sistema de vacío utilizado consta de una rotatoria

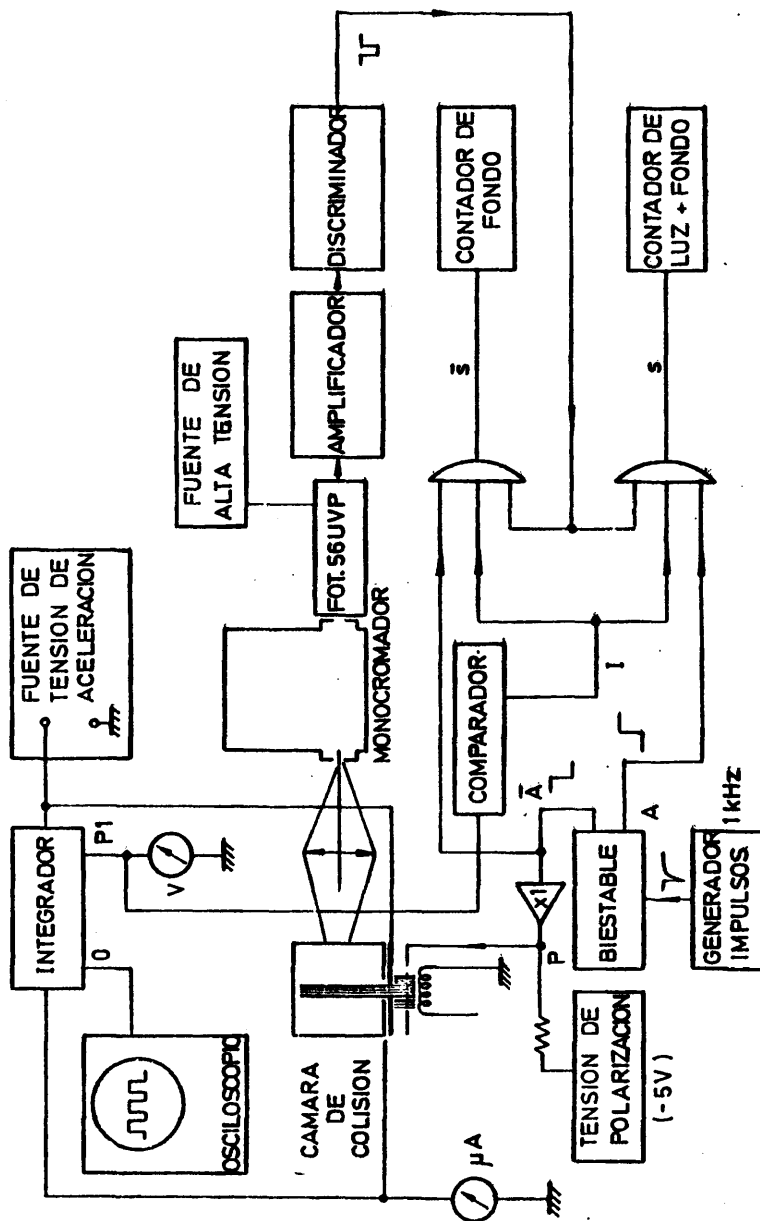


FIG. 2

DIAGRAMA BLOQUE DEL DISPOSITIVO DE MEDIDA DE SECCIONES EFICACES

CIRCUITO INTEGRADOR DE CARGA

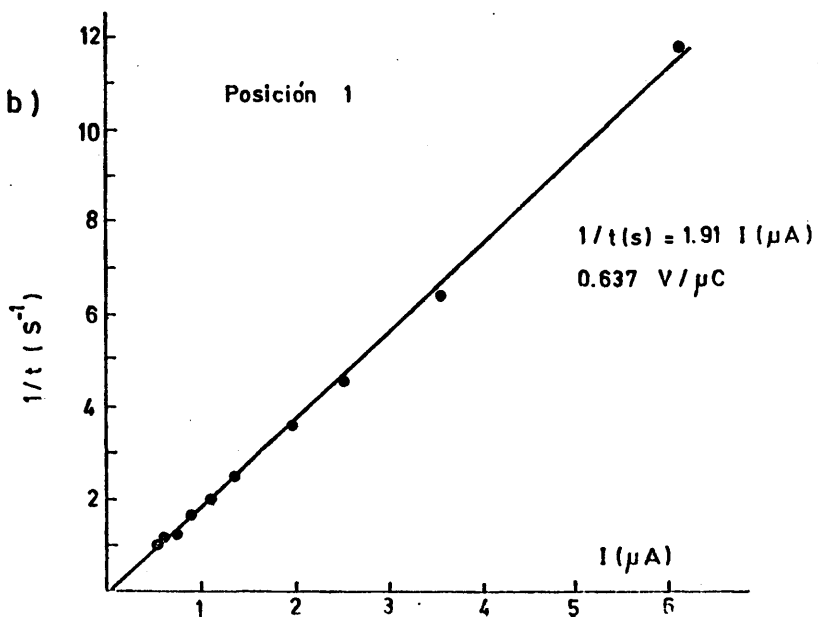
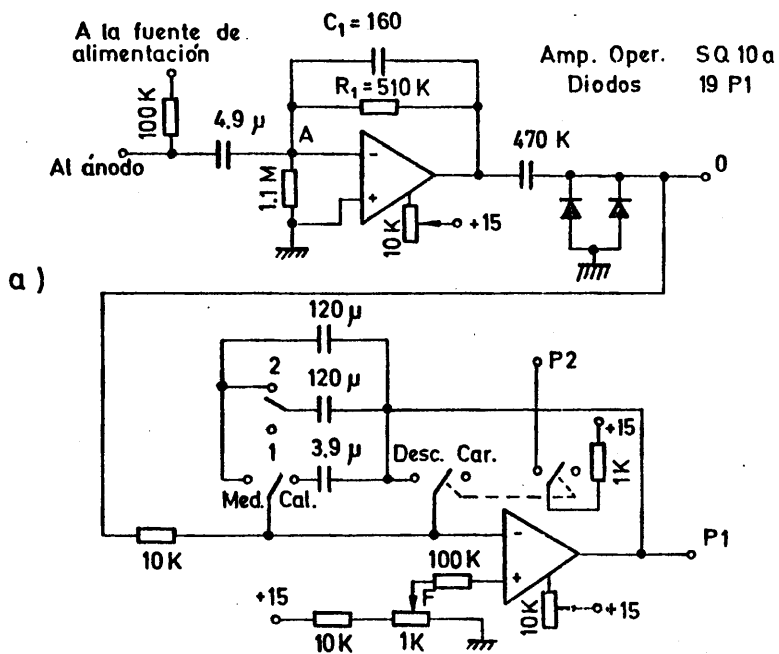


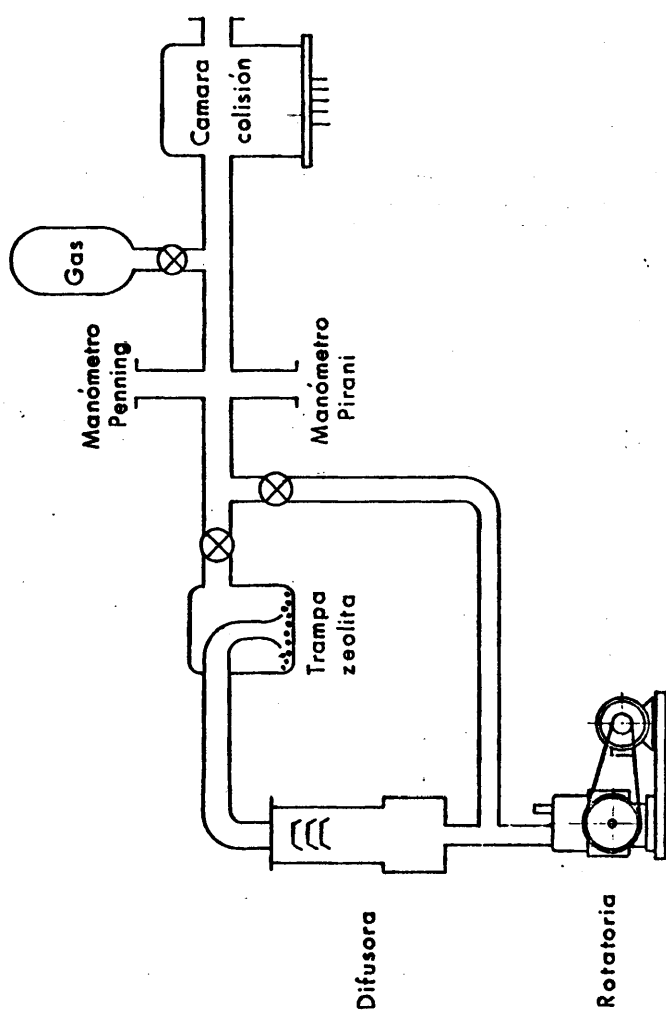
FIG. 3

seguida de una difusora tipo Leybold diff de 40 l/s de velocidad de aspiración, refrigerada por aire. Una trampa de zeolita con posibilidad de ser enfriada con aire líquido separa el grupo de bombeo con la línea de vacío propiamente dicha. Esta trampa de zeolita tiene por misión detener los vapores de aceite que pudieran subir desde la difusora debido a su gran poder de absorción, con lo que se puede conseguir mantener la línea de vacío libre de vapores de aceite entre otros. En la Fig. (4) puede verse un esquema del montaje. La línea de vacío consta de un manómetro Penning y uno Pirani para la medida de la presión; ambos son calibrados previamente. Una botella de gas puro a unas 2 atmósf. está conectada mediante una llave de aguja para controlar un flujo continuo. Una llave de vacío aísla el sistema de bombeo de la línea de vacío.

El conocimiento de la medida exacta de la presión existente en la cámara de colisión es de suma importancia para el cálculo de las secciones eficaces de excitación, ya que es un factor que interviene en las ecuaciones que se utilizan y su medida nos indica el número de moléculas del gas existente en el recinto. Por ello es necesario que los manómetros sean calibrados previamente para los distintos gases que se van a utilizar ya que su sensibilidad varía de unos gases a otros.

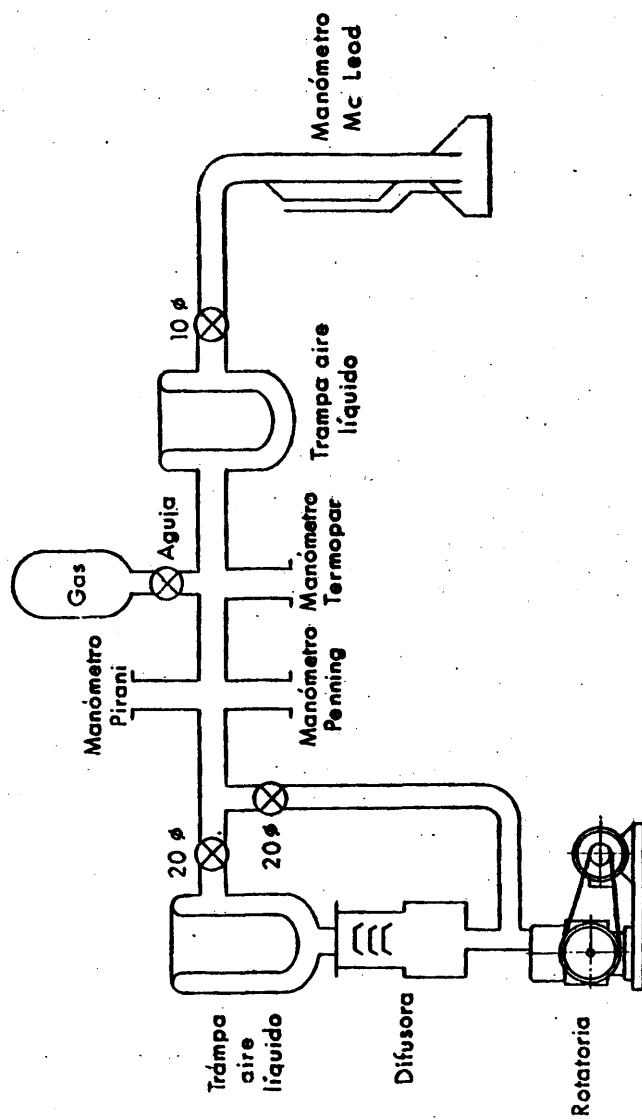
Para la calibración de los manómetros se utilizó un sistema de vacío independiente, formado por bombas rotatoria y difusora de aceite, de una trampa de aire líquido para evitar contaminación de vapores de aceite y de una entrada de gas con el que se efectúa la calibración con una llave de aguja. Un manómetro de mercurio tipo McLeod marca Kammerer se colocó en el otro extremo, junto con una trampa de aire líquido para evitar contaminación por mercurio, unido al resto por una llave.

En la Fig. (5) se muestra un esquema del sistema de calibración. El manómetro tipo McLeod se utiliza normalmente en todos los equipos de calibrado de manómetros porque la medida de la



ESQUEMA MONTAJE LINEA DE VACIO

Fig. 4



SISTEMA DE VACIO PARA CALIBRADO DE MANOMETROS

Fig. 5

presión viene relacionada por la diferencia de alturas de mercurio en los capilares y por lo tanto da una medida absoluta de la presión, independientemente de la naturaleza del gas. Cerrando un poco la llave de vacío se consigue un flujo continuo y una presión estable, con lo que el problema del gradiente de presión debido a las conductancias queda disminuido.

El manómetro Pirani se utilizó para medir la presión de trabajo que estaba en el rango de 1 a 20 mtorr. El manómetro Penning se utilizó para conocer la presión residual del sistema de vacío antes de introducir el gas. Era del orden de 10^{-6} Torr.

En la Fig. (6) se muestran las curvas de calibración del manómetro Pirani frente al McLeod para los gases N_2 , He y Ne. Esta presión ya corregida será la que intervenga en los cálculos realizados.

1.2.- MEDIDA DEL VALOR ABSOLUTO DE LA SECCION EFICAZ DE EXCITACION

1.2.1.- Descripción general

El valor absoluto de la sección eficaz de excitación se ha obtenido experimentalmente, como ya indicamos antes, tomando como patrón la sección eficaz de un nivel del He. Como vimos en 1.1.1 la intensidad luminosa producida por la desexcitación de un nivel i a uno j es proporcional a la sección eficaz de excitación del nivel i . Teniendo en cuenta (I.8) el número de fotones por seg. que llegan al fotomultiplicador en una transición $i \rightarrow j$ será de la forma

$$F_{ij} = G \cdot E(\lambda) \cdot N \cdot Q_{\sigma_{ij}} \quad (I.10)$$

donde G es una constante que incluye todos los factores geométricos, $E(\lambda)$ es la eficiencia de detección para esa longitud de onda, N es el número de átomos o moléculas en estado fundamental que puede ponerse de la forma $P = K \cdot N$; Q es la carga to

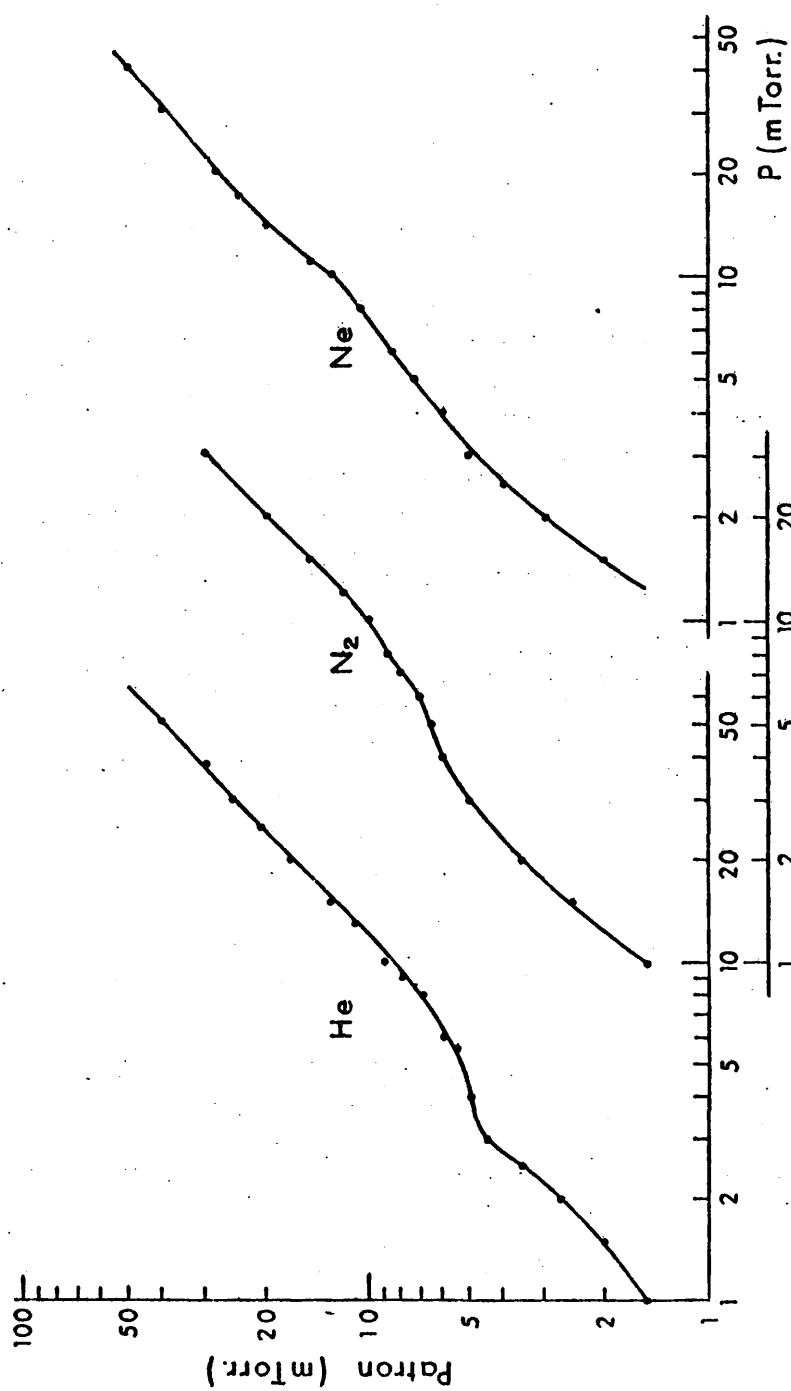


FIG. 6

CALIBRACIÓN DEL MANÓMETRO PIRANI PARA DISTINTOS GASES.

tal de electrones que han pasado durante ese periodo de tiempo.
 σ_{ij} es la sección eficaz parcial de la transición $i \rightarrow j$.

Supongamos ahora otra transición $i' \rightarrow j'$ que puede ser atómica o molecular, ocurrirá así mismo que

$$F_{i',j'} = G'E'(\lambda').N'.Q'\sigma_{i',j'}$$

Si consideramos que se mantienen todos los factores geométricos y las medidas están realizadas en las mismas condiciones, que en (I.10) se cumplirá:

$$\sigma_{ij} = \frac{F_{ij}}{F_{i',j'}} \cdot \frac{E'(\lambda')}{E(\lambda)} \cdot \frac{P'}{P} \cdot \frac{Q'}{Q} \cdot \sigma_{i',j'} \quad (I.11)$$

Para medir F_{ij} se han realizado muchas medidas de la intensidad luminosa para distintos valores de la presión. Esto debe ajustarse a una recta como se deduce de (I.10) y además pasar por el origen, pues evidentemente a presión nula no debe haber emisión alguna.

La pendiente obtenida, $F_{ij}/P = m$ corresponderá al valor medio y la (I.11) puede ponerse de la forma:

$$\sigma_{ij} = \frac{E'(\lambda')}{E(\lambda)} \cdot \frac{Q'}{Q} \cdot \frac{m}{m'} \cdot \sigma_{i',j'} \quad (I.12)$$

Los valores de la eficiencia E y E' se obtendrán a partir de la calibración del sistema de detección, como veremos más adelante.

Como ya indicamos antes, las intensidades luminosas se obtienen por el método de detección en fase.

Los valores de Q y Q' se conocen por medio del integrador de corriente, con el cual se mide la carga total que llega al ánodo durante cada medida.

1.2.2.- Sección eficaz del nivel 5'S del Helio

En el estudio teórico de las colisiones electrón-átomo pueden obtenerse resultados aplicando la ecuación de Schrödinger para un sistema físico determinado, pero las dificultades con las que se tropieza son enormes. Es necesario simplificar mucho y recurrir a aproximaciones matemáticas que al tiempo que facilitan el desarrollo de las ecuaciones, pierden exactitud y validez.

En el tratamiento de la excitación del He se han desarrollado diferentes métodos para el estudio de la sección eficaz (1),(5)(6). El más ampliamente utilizado por su sencillez es la primera aproximación de Born, que representa al electrón incidente por una onda plana. Una aproximación más elaborada de acoplamiento débil es la (D.W.P.O.) (distorted wave polarized orbital) que representa el electrón por funciones que describen su movimiento en el campo estático del átomo.

Para tomar una decisión ponderada sobre la validez de estos valores obtenidos por medio de aproximaciones matemáticas es imprescindible hacer una comparación con los resultados experimentales. Esta es una de las causas que hacen importante el estudio experimental de las secciones eficaces de excitación.

Nosotros utilizamos estos valores teóricos como punto de partida para nuestra comparación con las medidas realizadas en el laboratorio. Se tomó como patrón la sección eficaz de excitación del nivel 5'S. Los estados n'S tienen simetría esférica, no están polarizados ni están conectados ópticamente con el fundamental lo que nos evita el problema de atrape radiativo. Tampoco son probables las cascadas radiativas, ya que utilizamos niveles superiores altos.

El nivel 5'S tiene una transición ($5'S \rightarrow 2'P$) de longitud de onda 4.438 \AA que está próxima a la mayoría de los niveles que van a estudiarse y resulta el más idóneo para comparar.

En la Fig. (7) aparecen los resultados de las secciones eficaces de excitación obtenidas por varios investigadores (6), por la aproximación de Born utilizando los formularios de la longitud y de la velocidad, tomando funciones de onda de Hartree-Fock no restringidas. También vienen representados los resultados obtenidos por Scott y McDowell (7) aplicando dos variantes de la DWPO (distorted wave polarized orbital). Se observa que para energías intermedias este último método se aproxima más a los valores experimentales.

Examinando los resultados obtenidos por el método óptico en los trabajos más recientes, como puede verse en la Fig. (8) por (8),(9),(10) se observa que si bien entre ellos hay discrepancias, comparando con los resultados teóricos, existen un buen acuerdo con el método DWPO para energías intermedias y con la primera aproximación de Born para energías superiores a 400 eV .

1.2.3.- Correcciones

En un proceso de colisión los átomos pueden ser excitados por diferentes vías: impacto de electrones, cascadas radiativas, colisión átomo-átomo y atrape radiativo.

Salvo el impacto de electrones que es el proceso que estudiamos para medir la sección eficaz de excitación, los demás son procesos secundarios y deben ser corregidos en el caso de que se presenten, para obtener el valor absoluto. Vamos a estudiar a continuación estos casos y ver si realmente influyen en nuestras medidas.

1.2.3.1.- Cascadas radiativas

Se produce una población del nivel i por desexcitaciones procedentes de otros niveles, generalmente superiores, y que son independientes del proceso de colisión en estudio.

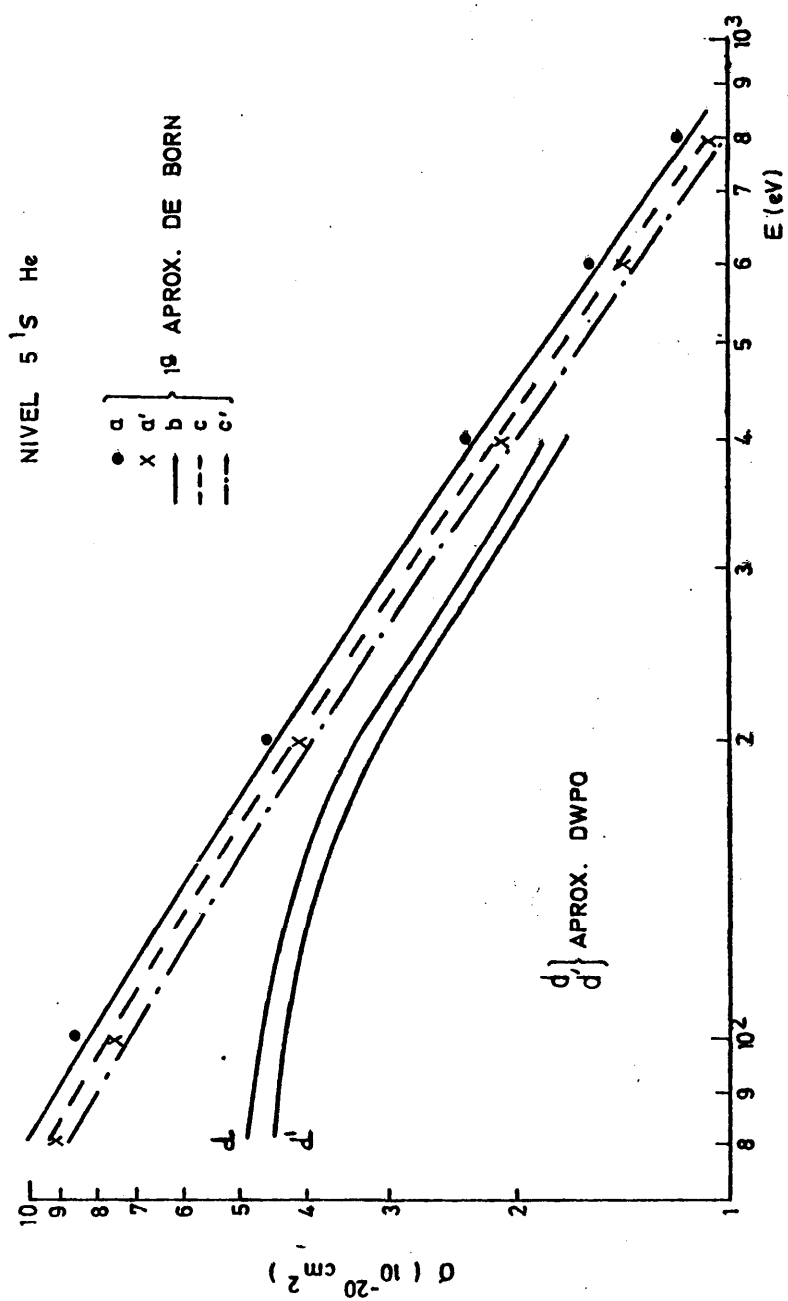


Fig: 7

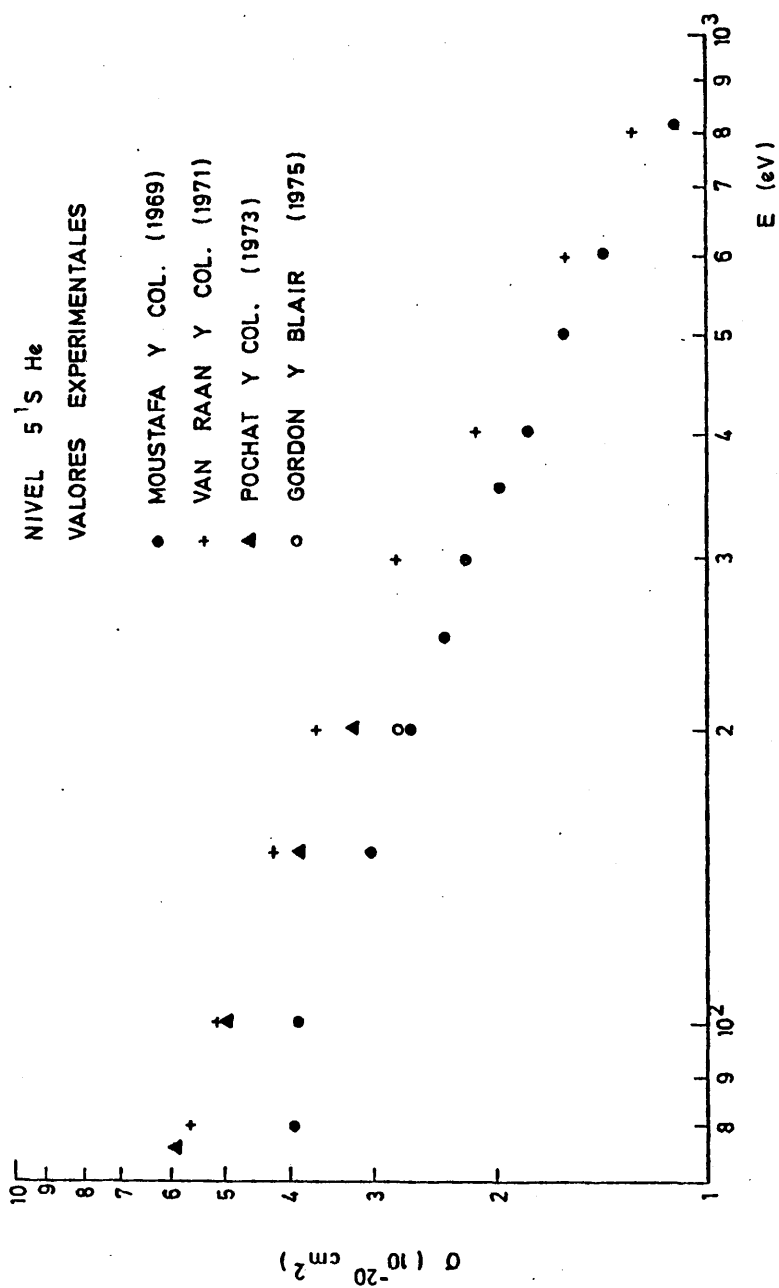


Fig.-8

Supongamos que el nivel i se puebla desde un nivel excitado, k con una población n_k . La ecuación (I.3) quedará de la forma:

$$\frac{dn_i}{dt} = N\phi\sigma_i - \frac{n_i}{\tau_i} + A_{ki}n_k \quad (I.13)$$

donde A_{ki} es la probabilidad de transición del nivel k al i . En el supuesto de que el nivel k no se puebla por otro, resulta que

$$\frac{dn_k}{dt} = N\sigma_k\phi - \frac{n_k}{\tau_k} \quad (I.14)$$

donde σ_k y τ_k son la sección eficaz y la vida media del nivel k , respectivamente.

Al cabo de un cierto tiempo $t \gg \tau_k$ y τ_i se obtiene un equilibrio, y resolviendo las ecuaciones (I.13) y (I.14) se obtiene un valor para n_i dado por:

$$n_i = \tau_i N \phi (\sigma_i + A_{ki} \tau_k \sigma_k) \quad (I.15)$$

en donde llamando

$$\sigma_i' = \sigma_i + A_{ki} \tau_k \sigma_k \quad (I.16)$$

a la sección eficaz aparente, (I.15) queda:

$$n_i = \tau_i N \phi \sigma_i'$$

En este caso el valor de I_i de la ecuación (I.7) habrá que modificarlo y ponerlo de la forma:

$$I_i = N \phi \frac{A_{ij}}{\sum_j A_{ij}} \cdot \sigma_i' \quad (I.17)$$

en σ_i' va incluida la fracción correspondiente al proceso de población por cascada radiativa.

En general la sección eficaz de excitación de i y de k tendrán una dependencia con la energía diferente y por tanto las funciones de excitación óptica serán distintas en cada caso. Es decir, la sección eficaz aparente σ_i será distinta de la sección eficaz parcial σ_i del nivel.

En los casos en que hay población por cascadas, la sección eficaz de excitación que se mida (aparente) es mayor que la sección eficaz de excitación del nivel (parcial) y para obtener resultados exactos es necesario hacer una corrección de la fracción que corresponda a la cascada.

Varios investigadores estudiaron el problema (9),(11),(12), (13) y la manera de corregir la cascada. Un método que puede utilizarse consiste en determinar la sección eficaz aparente absoluta de los niveles que producen las cascadas y teniendo en cuenta (I.16) junto con el conocimiento de las probabilidades de transición, hallar el descuento correspondiente a cada nivel.

Este procedimiento es largo pues es necesario medir las secciones eficaces de excitación de todas las transiciones que pueblan el nivel i desde niveles superiores y después de aplicarle la razón de ramificación correspondiente, descontárselo a la sección eficaz de excitación aparente. Con ello se introducen también errores, además de hacer la medida interminable, pues en general esas desexcitaciones son de débil intensidad.

Otro método para comprobar la existencia de población por cascada, consiste en representar la sección eficaz de excitación del nivel en estudio en función de la energía de los electrones. En una gráfica $\log I - \log E$ pendiente que resultará debería estar en un razonable acuerdo con las aproximaciones de Born y la de Ochkur (14) según las cuales la sección eficaz del nivel decrece como $(1/E)$ para transiciones "ópticamente prohibidas" entre niveles de la misma multiplicidad y como $(1/E)^3$ para excitación de niveles de distinta multiplicidad (13). Pero esto no se cumple

exactamente en las medidas experimentales y además la proporción que había que descontar de esa pendiente daría lugar a errores impredecibles.

Un método sencillo y directo para corregir la cascada está basado en el análisis temporal de la desexcitación de un nivel. Este procedimiento es el que utilizamos en este trabajo para aquellos niveles que creemos están poblados por cascadas. Por lo extenso de su explicación y desarrollo, será objeto de un estudio especial en el apartado 1.2.5.

1.2.3.2.- Atrape radiativo

Esto ocurre cuando los fotones producidos en la desexcitación son reabsorbidos por el gas. En las transiciones entre estados excitados es despreciable, pero para líneas resonantes que están conectadas con el estado fundamental la influencia es apreciable. En estos casos la vida media del estado excitado se hace aparentemente mayor y la población en lugar de concentrarse en el haz, se dispersa y aumenta de volumen. Este efecto da lugar a que exista una dependencia de la función de excitación con la presión y hace necesario asegurar que la densidad del gas sea pequeña para que la absorción sea despreciable.

La importancia del atrape radiativo en el estudio de la sección eficaz de excitación de niveles como por ejemplo el $n^{\circ}P$ del Helio, es evidente, porque introduce un error importante en la medida. Todos los investigadores lo tienen en cuenta a la hora de hacer las correcciones, pero en las medidas presentadas en este trabajo no aparecen porque no hemos trabajado con líneas resonantes, por lo que no ha sido necesario realizar ninguna corrección.

Para evitar cometer algún error por este proceso, se mide la sección eficaz por extrapolación de las medidas a presión cero.

En las medidas realizadas en este trabajo se ha comprobado que la intensidad luminosa de todas las transiciones es independiente de la presión y en las figuras presentadas se observa que se obtiene una relación lineal $I = f(P)$ y que la correspondiente línea recta pasa por el origen.

1.2.3.3.- Población por colisiones

En este proceso un átomo excitado es desexcitado en una colisión con un átomo neutro con una transferencia de energía y posible cambio del momento angular y de spin. Aparece generalmente en la medida de niveles de vida media larga. Gabriel y Heddle (11) estudiaron este proceso en algunas líneas del Helio que fueron también estudiadas por St. John y Fowler (16) así como por McConkey y col.(25) en la molécula de nitrógeno.

Para estudiar este efecto supongamos el nivel i con una población n_i , como anteriormente se indicaba y una población N en el fundamental. Cuando hay una desexcitación del nivel i por colisión con un átomo neutro, la ec. (1.3) toma la forma

$$\frac{dn_i}{dt} = - \frac{n_i}{\tau_i} - n_i N \sigma_{ci} \bar{v} \quad (1.18)$$

donde σ_{ci} es la sección eficaz de desexcitación del nivel i por colisión con átomos del estado fundamental.

\bar{v} es la velocidad relativa media de los átomos o moléculas

$$\frac{dn_i}{dt} = - n_i \left(\frac{1}{\tau_i} + N \sigma_{ci} \bar{v} \right) = - n_i \frac{1}{\tau_{ai}}$$

siendo

$$\tau_{ai} = \left(\frac{\tau_i}{1 + N \sigma_{ci} \bar{v} \tau_i} \right) \quad (1.19)$$

la vida media aparente, que es más pequeña que la del nivel.

La ec. (1.4) tendrá ahora la forma:

$$n_i = N \phi \sigma_{ij} \tau_{ai}$$

y la intensidad en una transición al nivel j :

$$I_i = N \phi \sigma_{ij} \frac{\tau_{ai}}{\tau_i}$$

en donde podemos llamar $\sigma_{ij} \frac{\tau_{ai}}{\tau_i} = \sigma_{aij}$ sección eficaz parcial aparente, que lleva incluido el factor correspondiente a la desexcitación colisional.

Teniendo en cuenta (1.19):

$$(1.19.a) \quad \sigma_{aij} = \sigma_{ij} \frac{1}{1 + N \bar{v} \sigma_{ci} \tau_i} \quad \text{en donde el denominador}$$

es independiente de la energía de los electrones y por lo tanto no influye en la función de excitación. Sin embargo sí que influye en la medida del valor absoluto de la sección eficaz de excitación, por lo que habrá que tenerlo en cuenta en los casos en que este proceso se presente.

Se observa en (1.19.a) que este término corrector es dependiente de la presión y la gráfica intensidad-presión mostrará una no linealidad a partir del valor de la presión en que este efecto tenga lugar.

En las medidas realizadas en este trabajo se ha comprobado siempre que la intensidad luminosa es independiente de la presión en el recinto. En algún caso que veremos más adelante en que la gráfica intensidad-presión deja de ser lineal en algún punto y que pudiera ser debido a procesos de desexcitación colisional, es

te efecto no ha influido en el resultado de la medida, pues hemos tomado la pendiente en el origen y se han realizado las medidas a presiones por debajo de las cuales este efecto se presenta.

1.2.4.- Otras correcciones

Además de las correcciones que hemos estudiado en la sección anterior y que dependen de un proceso de colisión determinado, que pueden tener lugar o no, existen un gran número de correcciones que son inherentes al propio sistema de medida y que deben siempre tenerse en cuenta. Estos son por ejemplo el estudio del perfil instrumental, eficiencia del sistema óptico, y otros efectos que se estudiarán a continuación.

1.2.4.1.- Perfil instrumental

La eficiencia del sistema de detección está influida por la forma espectral que presentan las distintas líneas o bandas que se quiere comparar.

La intensidad real $I(\lambda_0)$ para una cierta longitud de onda λ_0 a la que emite, atraviesa las rendijas del monocromador. Dicho aparato tiene un cierto perfil instrumental que llamaremos $P_i(\lambda)$. La intensidad observada por el fotomultiplicador es la convolución de ambas:

$$I_F(\lambda_0) = \int_0^{\infty} P_i(\lambda_0 - \lambda') I(\lambda') d\lambda' \quad (1.20)$$

teniendo en cuenta que $I(\lambda) = 0$ para $\lambda < 0$ se puede escribir también (1.20) de la forma:

$$I_F(\lambda_0) = \int_{-\infty}^{\lambda_0} P_i(\lambda') I(\lambda_0 - \lambda') d\lambda' \quad (1.21)$$

siendo λ_0 la longitud de onda a la que se realiza la medida.

Si el perfil instrumental es de tal forma que

$$\begin{aligned} P_i(\lambda) &= p & \text{para} & \quad |\lambda| < \frac{\Delta\lambda}{2} \\ &= 0 & \text{para} & \quad |\lambda| > \frac{\Delta\lambda}{2} \end{aligned}$$

(I.21) se puede poner

$$I_F(\lambda_0) = \int_{-\Delta\lambda/2}^{+\Delta\lambda/2} P_i(\lambda') I(\lambda_0 - \lambda') d\lambda' = p \int_{-\Delta\lambda/2}^{+\Delta\lambda/2} I(\lambda_0 - \lambda') d\lambda'$$

integrando

$$\int_0^\infty I_F(\lambda_0) d\lambda = \int_0^\infty \int_{-\infty}^{\lambda_0} P_i(\lambda') I(\lambda - \lambda') d\lambda d\lambda'$$

resulta pues

$$\int_0^\infty I_F(\lambda) d\lambda = c \int_0^\infty I(\lambda) d\lambda$$

Es decir, el área total obtenida por el sistema detector es igual al área real formada por la banda salvo un factor c que es constante e independiente de λ y que tratándose de intensidades relativas, no influye.

Una medida de la anchura de la banda tal como es observada por el sistema nos la da la relación $A/I_F(\lambda_0)$ siendo A el área de la banda detectada

$$A = \int I_F(\lambda) d\lambda$$

Cuando la anchura de la línea o banda es menor que la anchura

del perfil, la intensidad medida es igual a la intensidad real y se ha comprobado también que la relación de áreas es igual a la de las alturas en el máximo.

En nuestro trabajo hemos utilizado los dos métodos. Para el caso de espectros atómicos en el que la anchura era menor que el perfil se han medido las alturas de las líneas, y para las moléculas que poseían anchura superior a la resolución del monocromador se utilizó la multiescala para medir las áreas.

En este caso las eficiencias de detección $E(\lambda)$ y $E'(\lambda')$ de la ec. (I.12) debe ponerse de la forma

$$\frac{E'(\lambda')}{E(\lambda)} = \frac{\epsilon'(\lambda')}{\epsilon(\lambda)} \times \frac{A'/I(\lambda')}{A/I(\lambda)} \quad (I.22)$$

donde $\epsilon'(\lambda')$ y $\epsilon(\lambda)$ son las eficiencias del sistema óptico para longitudes de onda λ y λ' cuyo estudio se verá inmediatamente.

I.2.4.2.- Eficiencia del sistema óptico. Polarización de la radiación.

La medida de la intensidad luminosa debe ser corregida según la diferente eficiencia del sistema óptico que no es la misma en diferentes zonas del espectro.

Se define la eficiencia $\epsilon(\lambda)$ como la relación $\frac{R(\lambda)}{I(\lambda)} = \epsilon(\lambda)$ donde $R(\lambda)$ es la respuesta del sistema es decir, la medida obtenida de una fuente luminosa de intensidad $I(\lambda)$ para esa longitud de onda.

Conociendo la dependencia de ϵ con λ de forma relativa, pueden hacerse las correcciones de intensidad relativa que son las únicas que interesan en este trabajo. Para conocer la eficiencia de nuestro sistema óptico se ha medido la respuesta de una fuente

luminosa de un espectro continuo conocido. Por supuesto esta fuente luminosa debe tener semejantes características geométricas que el haz de fotones que se obtiene en las medidas.

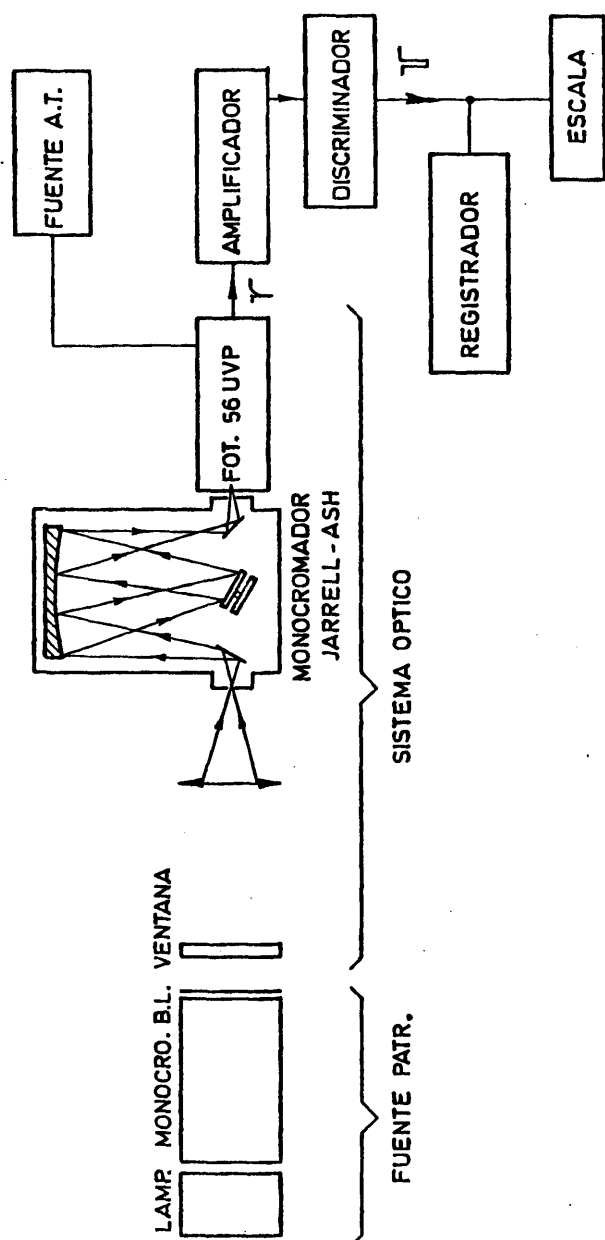
Para la calibración del sistema óptico visible se utilizó una fuente de tungsteno-yodo "Bausch and Lomb" y un monocromador con una red de 1350 trazos/mm. El conjunto estaba situado en la misma posición que el haz de electrones de la cámara. El espectro se midió con una termopila "Sensor" L66 con ventana de KBr y un fotomultiplicador EMI 9781B de respuesta conocida, independientemente. Se encontró buen acuerdo entre ambas medidas. Para la calibración del sistema óptico en la zona del ultravioleta se procedió igualmente, salvo que el monocromador y el fotomultiplicador eran distintos, elegido de forma que tuvieran una gran eficiencia en esa región del espectro.

En la Fig. (9) puede verse el dispositivo experimental utilizado para la calibración.

Los valores obtenidos de estas eficiencias que se muestran en las Figs. (10) y (11) han servido no solamente para las medidas de la sección eficaz de excitación, sino para las medidas de las intensidades relativas.

Usualmente los instrumentos modifican el estado de polarización de la luz. Esto puede ocurrir por ejemplo en casos en que el vector eléctrico normal y paralelo al haz luminoso tienen diferente transmisión efectiva y también en la superficie de un prisma donde la reflexión parcial de la luz incidiendo oblicuamente puede modificar el estado de la polarización. Está demostrado (1) que la relación entre la intensidad transmitida y la incidente no es constante, sino que es función del estado de polarización de la radiación incidente, lo cual a su vez es función de la energía de los electrones.

En un trabajo anterior (15) realizado en este laboratorio se comprobó que la luz de la fuente de calibración estaba parcial



DISPOSITIVO DE CALIBRACION DEL SISTEMA OPTICO

Fig. 9

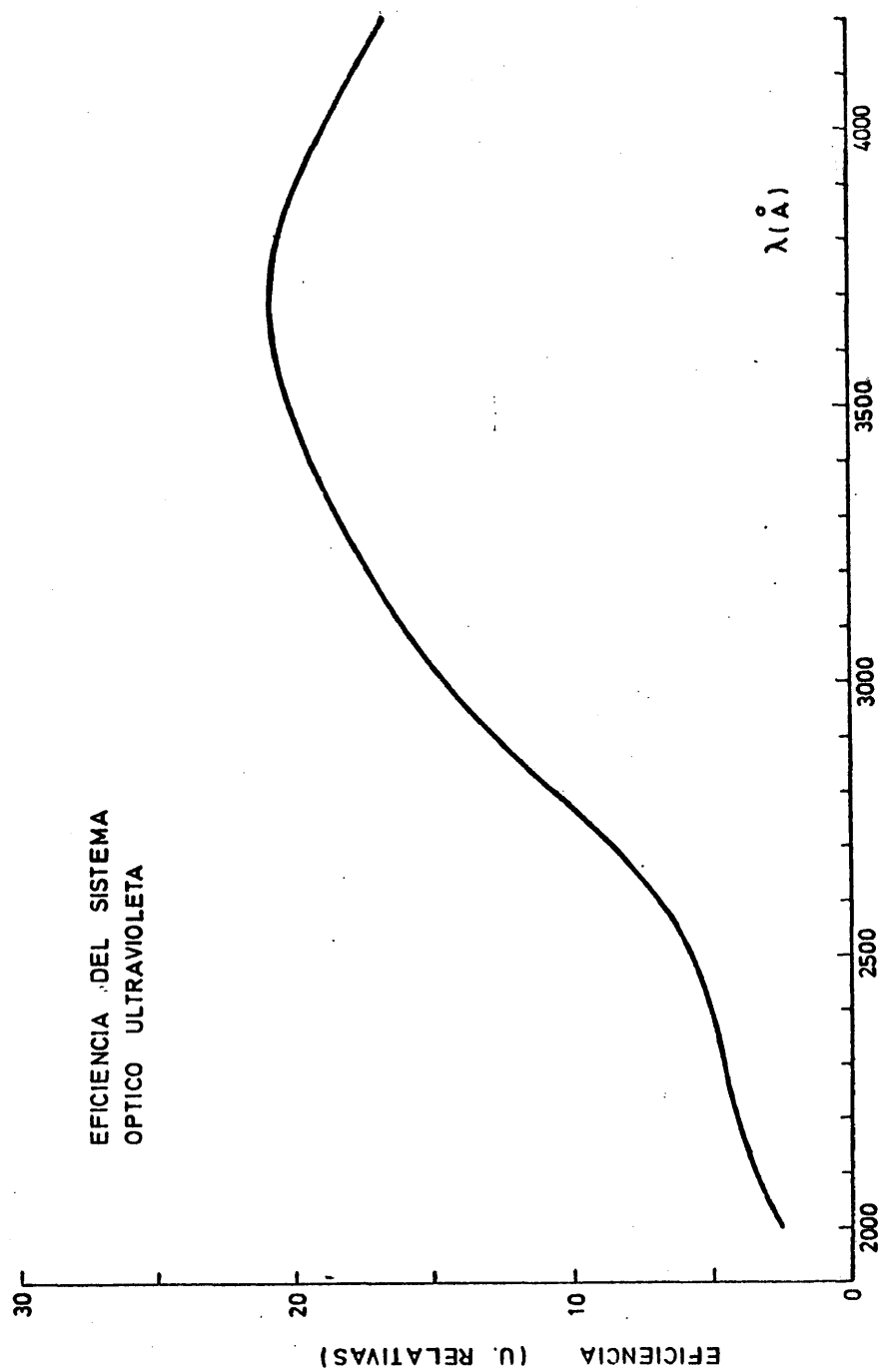


Fig.10

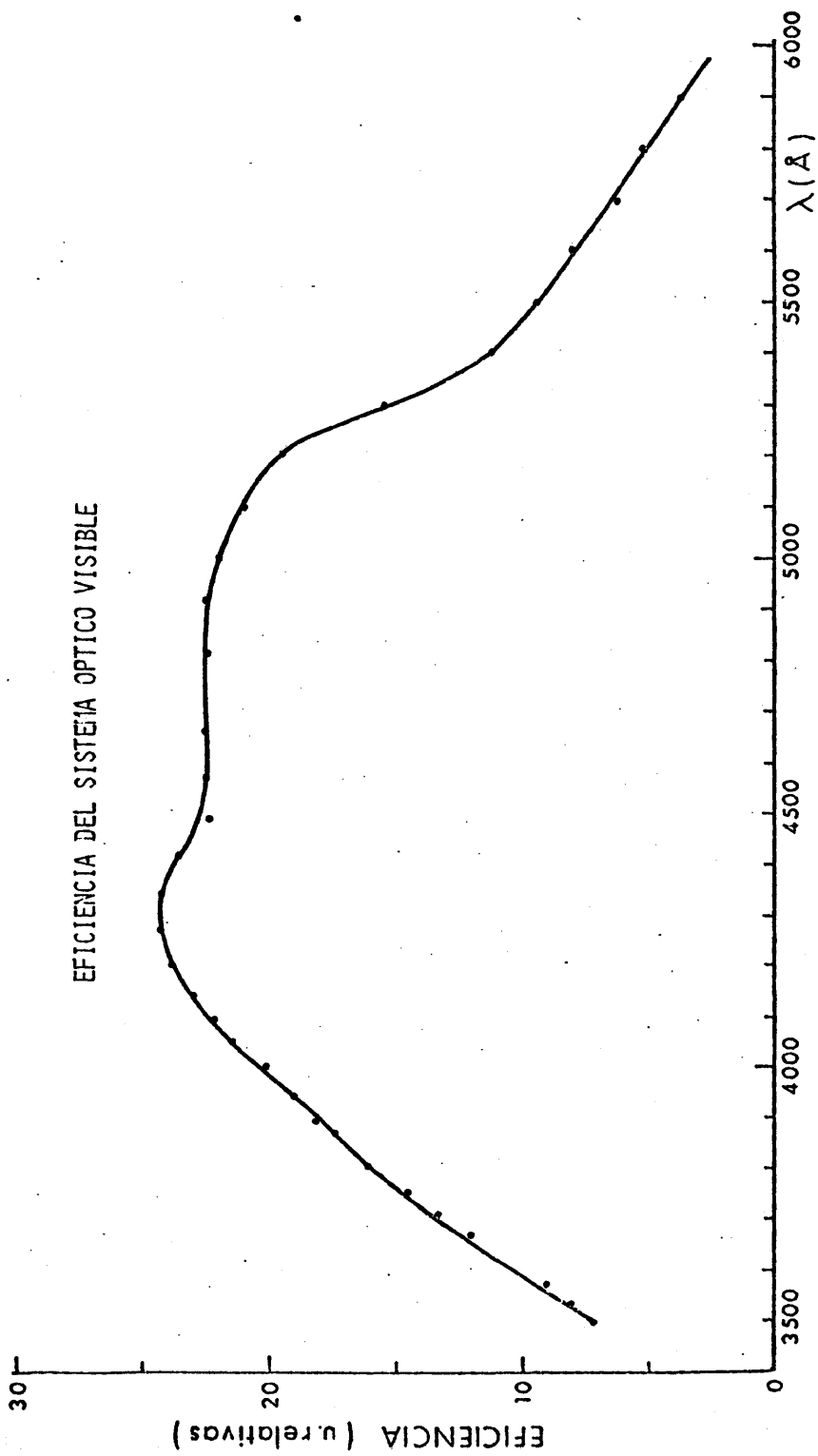


Fig. 11

mente polarizada debido a la presencia del monocromador "Bausch and Lomb". Mediante una fuente no polarizada y un polarizador se midió la respuesta de nuestro sistema en función del ángulo de polarización y se comprobó que para las direcciones paralelas y perpendiculares la eficiencia de este sistema óptico es la misma que para la luz no polarizada. En éste sentido no fue necesario realizar ninguna corrección más.

También se estudió la anisotropía (15) de la radiación producida en la desexcitación de los niveles. Estos efectos son importantes en el caso de medidas realizadas para energías cerca del umbral, en donde el tanto por ciento de polarización es grande (4), (9), (10).

En las medidas realizadas por nosotros, tanto en la medida de secciones eficaces de excitación como en las de intensidades relativas, la energía de los electrones era muy superior al umbral de excitación, por lo que la luz emitida no se encuentra polarizada. Por lo tanto la eficiencia que medimos corresponde a la luz no polarizada.

1.2.4.3.- Efectos producidos por el campo eléctrico.

Los problemas a que da lugar el campo eléctrico producido por un haz de electrones son principalmente la carga espacial formada por el propio haz, los campos eléctricos debidos al potencial de contacto, los debidos a cargas acumuladas en superficies aislantes y la penetración de campo originados por la geometría de los electrodos.

La cuestión de los efectos producidos por campos eléctricos dan lugar a problemas difíciles y de amplia discusión. El problema de carga espacial fue estudiado por Heddle y otros (17), (18).

La magnitud del campo eléctrico radial E_r producido por

una carga espacial puede estimarse suponiendo un haz infinitamente largo, con densidad uniforme,

$$E_r = 0.3 [I/(E)^{1/2}] (R)^{-1} \text{ (V/cm)}$$

en la parte exterior del haz, disminuyendo a medida que se acerca al eje del haz, cuando $R \rightarrow 0$.

Siendo

E = energía de los electrones en eV ;

R = radio del haz en mm

I = corriente de electrones en μA

En nuestro trabajo, el haz tiene un radio aproximado de 1 mm con una corriente máxima de 15 μA . Para medidas realizadas a 100 eV. El campo eléctrico dentro del haz

$$E_{\text{radial}} = 0.45 \text{ V/cm} \quad (1.23)$$

De las condiciones experimentales descritas en la literatura se puede inducir que son admitidos normalmente campos de hasta 1 ó 2 V/cm. Como se observa en (1.23) no existe ningún problema en nuestras medidas, pero sería más acusado en las medidas realizadas cerca del umbral de excitación y aun en ese caso para energías de 25 eV por ejemplo, la $E_{\text{radial}} = 0.9 \text{ V/cm}$. También ocurre que para energías cerca del umbral de ionización en el caso de los iones se produce una carga espacial de iones positivos que anula parte de la carga espacial negativa y este efecto queda parcialmente compensado.

El problema de la penetración de campo está producido por la forma y distancia en que están colocados los electrodos. Como se explicó anteriormente, se colocó un electrodo suplementa-

rio con la misión de evitar esta penetración de campo.

Los electrodos estan todos recubiertos de grafito para evitar la influencia de los electrones secundarios que causan problemas en la excitación de átomos, principalmente en el caso de las líneas cuyo descenso de intensidad al aumentar la energía de los electrones sea más rápido (excitación singlete \rightarrow tripleta). Este efecto aumenta mucho con la energía de los electrones, pero en nuestras medidas no lo hemos detectado.

Se comprobó también que la intensidad luminosa por unidad de carga de una línea dada, era independiente de la intensidad de la corriente de electrones, lo que nos asegura que los efectos que pueda producir el campo eléctrico son despreciables.

1.2.5.- *Determinación de la desexcitación de un nivel atómico y molecular.*

Como indicamos anteriormente en el apartado 1.2.3.1, para conocer el porcentaje de luz correspondiente a una cascada radiativa, uno de los métodos utilizados es el de medir la vida media del nivel en estudio por medio del análisis temporal de la desexcitación de ese mismo nivel.

La intensidad de la luz emitida en una transición entre dos niveles es proporcional a la población del nivel de partida. La evolución temporal de la luz nos da la evolución de la población de ese nivel, es decir, una despoblación que sigue una ley exponencial. Si no hay ningún otro efecto, se obtiene de ahí directamente la vida media. Si hubiera algún efecto de cascada, se observaría que la vida media resultante sería mayor que la propia del nivel y se encuentran varias componentes debidos a las cascadas.

Uno de los métodos utilizados para medir la vida media de un nivel es el método de coincidencias retardadas que se han

usado extensamente en este Laboratorio (15),(19),(40).

Este método consiste en medir de forma repetida el tiempo que transcurre entre un impulso que está sincronizado con el haz, y la llegada del primer fotón obteniéndose directamente la curva de desexcitación.

I.2.5.1.- Método y dispositivo de medida.

La excitación de las moléculas se realiza mediante un haz pulsado de electrones de baja energía y como se dijo antes, se utilizó el método de medida de tiempos mediante coincidencias retardadas.

Un impulso sincronizado con el haz de electrones ataca la entrada de comienzo de un convertidor de tiempo en amplitud. La salida del fotomultiplicador se lleva a la entrada de parada. El espectro de amplitudes que se obtiene a la salida del convertidor nos da la evolución temporal de la intensidad luminosa. Los datos son almacenados en un analizador multicanal. El dispositivo experimental es similar al utilizado para la medida de secciones eficaces de excitación. El sistema óptico igualmente está constituido por una lente de 20 dioptrías que enfoca el haz luminoso sobre la entrada del monocromador y se dispone a continuación un fotomultiplicador sensible capaz de detectar fotones individuales.

El sistema de medida de tiempos está formado por un generador doble de impulsos y una de las salidas marca el origen de tiempos en el convertidor tiempo amplitud y además se lleva a un circuito biestable volcándole. La otra salida se retrasa un cierto tiempo, mediante un retardo calibrado y se aplica al circuito biestable volviéndole a su posición inicial. Dicho biestable proporciona el impulso de excitación del haz de electrones. En la Fig. (12) se muestra el diagrama bloque del dispositivo para la medida de vidas medias.

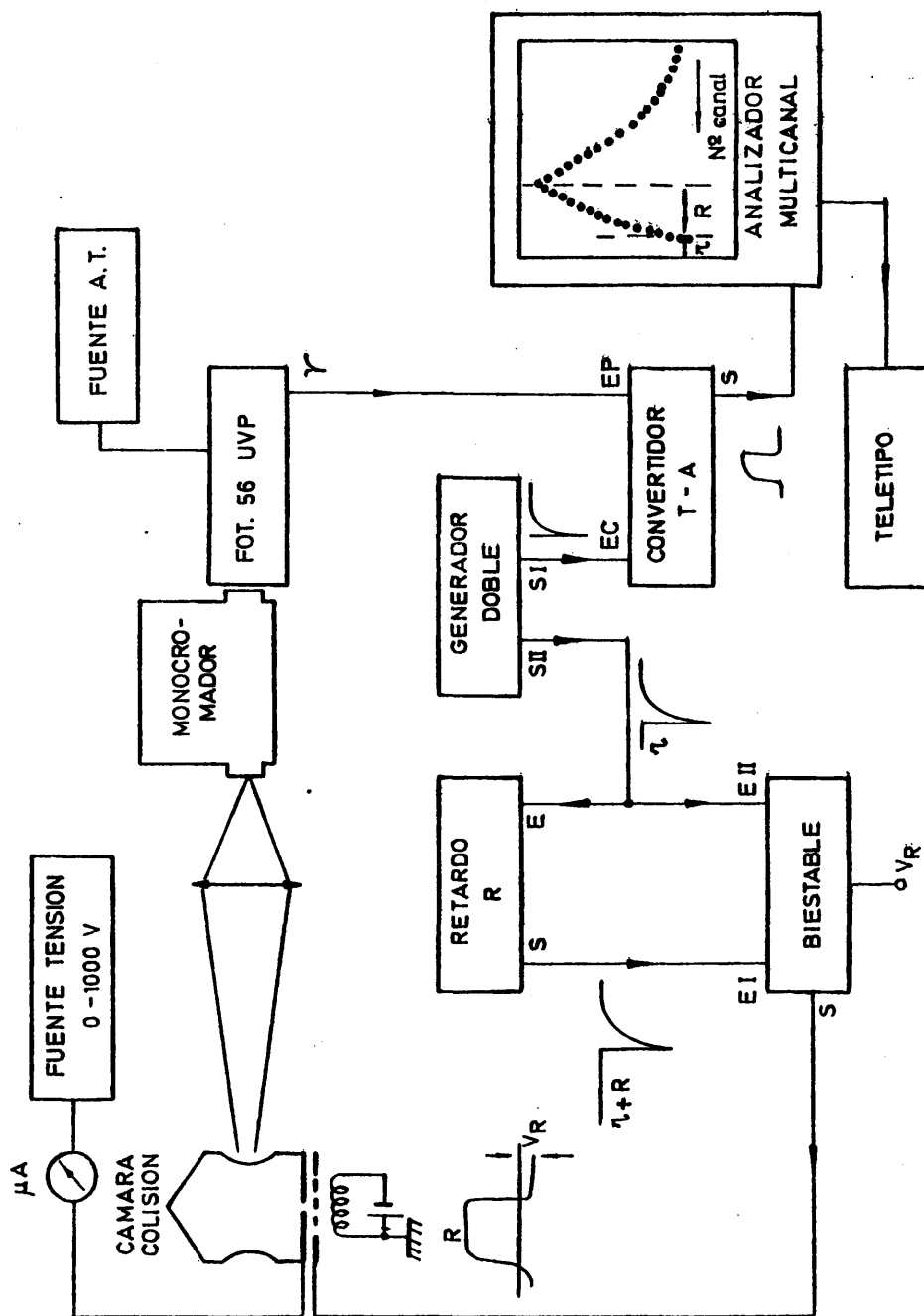


DIAGRAMA BLOQUE DEL DISPOSITIVO DE MEDIDA DE VIDAS MEDIAS

La utilidad de un dispositivo como el convertidor tiempo amplitud es que da impulsos de amplitud que son proporcionales al tiempo que transcurre hasta la detección del primer fotón.

El analizador multicanal que registra el espectro de amplitudes es del tipo Hewlett-Packard 5401 B con 1024 canales.

1.2.5.2.- Medida de la población por cascada a partir de la vida media del nivel.

Como se dijo antes, la intensidad luminosa de una línea o banda es proporcional a la población del nivel de partida. Cuando cesa el impulso de excitación, la población del nivel excitado disminuye exponencialmente con la vida media del nivel. Por lo tanto la disminución de la intensidad luminosa sigue el mismo ritmo que la del nivel si, y sólo si no hay algún otro efecto secundario que se suma al proceso de desexcitación.

Los efectos secundarios que pueden afectar a las medidas son básicamente los mismos que los ya expuestos en el caso de medidas de secciones eficaces, en 1.2.3. Aquí nos ceñiremos al problema de la población por cascadas, puesto que utilizamos este método de medida de la vida media para su estudio.

Sea el flujo de electrones $\phi(t)$ que es modulado de tal modo que verifica

$$\begin{aligned}\phi(t) &= \phi & \text{para} & \quad 0 < t < t_0 \\ \phi(t) &= 0 & t & \geq t_0\end{aligned}$$

donde t_0 es el tiempo que dura el impulso de excitación siendo mucho mayor que las vidas medias τ_i y τ_k ; recordamos que τ_k es la vida media del nivel k que puebla por cascada al nivel i y τ_i la vida media del nivel en estudio.

La población del nivel i disminuye con el tiempo exponencialmente, de la forma

$$n_i(t) = I_1 e^{-(t-t_0)/\tau_i} + I_2 e^{-(t-t_0)/\tau_k} \quad (1.24)$$

es la suma de dos exponenciales con vidas medias τ_i y τ_k y con amplitudes:

$$I_1 = N\sigma_i\phi\tau_i - \frac{A_{ki}N\sigma_k\phi}{\frac{1}{\tau_i} - \frac{1}{\tau_k}} \quad (1.25)$$

$$I_2 = \frac{A_{ki}N\sigma_k\phi}{\frac{1}{\tau_k} - \frac{1}{\tau_i}} \quad (1.26)$$

En el caso de que no hubiese población desde el nivel k $I_2 = 0$, $A_{ki} = 0$ (1.24) sería $n_i(t) = I_1 e^{-(t-t_0)/\tau_i}$ es decir, una exponencial simple con $I_1 = N\sigma_i\phi\tau_i$. Tomando las ec. (1.16), (1.25) y (1.26) se deduce que

$$\sigma_i = \sigma_i' \left(\frac{I_1}{I_1 + I_2} + \frac{I_2}{I_1 + I_2} \frac{\tau_i}{\tau_k} \right) \quad (1.27)$$

Con el método descrito de medida de vidas medias puede conocerse τ_i , τ_k , I_1 y I_2 con lo cual podemos conocer el factor de corrección que es necesario aplicar a la sección eficaz aparente σ_i' para obtener el valor de la sección eficaz real (19), (20).

Si este estudio de la desexcitación de un nivel se realiza para distintas energías del haz de electrones, se obtiene la función de excitación a partir de la función óptica de excitación. Igualmente se corrigen las medidas absolutas de la sección eficaz. En algunas de nuestras medidas, las que se refieren a transiciones de estados triplete del Helio, se presentaron problemas de cascadas que fueron corregidas por este método.

También se comprobó si en el nivel 5'S del Helio existía

alguna componente de cascada, verificándose lo admitido por algunos autores (27),(9),(13) que la población por cascada de niveles superiores al nivel 5'S del Helio contribuía con un factor aproximado del 5%.

En la Fig. (13) puede verse una curva de desexcitación del nivel 5'S (4.438 \AA).

I.3.- MEDIDA DE INTENSIDADES RELATIVAS DE TRANSICIONES MOLECULARES.

I.3.1.- Descripción general

A partir del análisis del espectro realizado a baja presión se han medido las intensidades relativas de las bandas moleculares del N_2 y N_2^+ .

Utilizando el mismo método que el empleado para la medida de secciones eficaces y vidas medias, se consigue la excitación de las moléculas en la cámara de colisión (I.1.2).

El mismo sistema óptico que el descrito en (I.1.2.3) se ha utilizado en estas medidas. La salida del fotomultiplicador es llevada a un amplificador y después a un discriminador de amplitudes para llegar a continuación a una unidad de recuento.

En unos casos se utilizó un frecuenciómetro de impulsos cuya salida iba a un registrador y en otros casos se utilizó como unidad de recuento un analizador multicanal operando como multi-escala. En la Fig. (14) puede verse el dispositivo experimental.

Se han realizado las medidas a una presión constante cuyo rango varió de 1 a 10 mtorr y se excitaron los electrones con una energía de 15 eV para el caso del N_2 . En el caso de la molécula ionizada, N_2^+ se utilizó un potencial acelerador

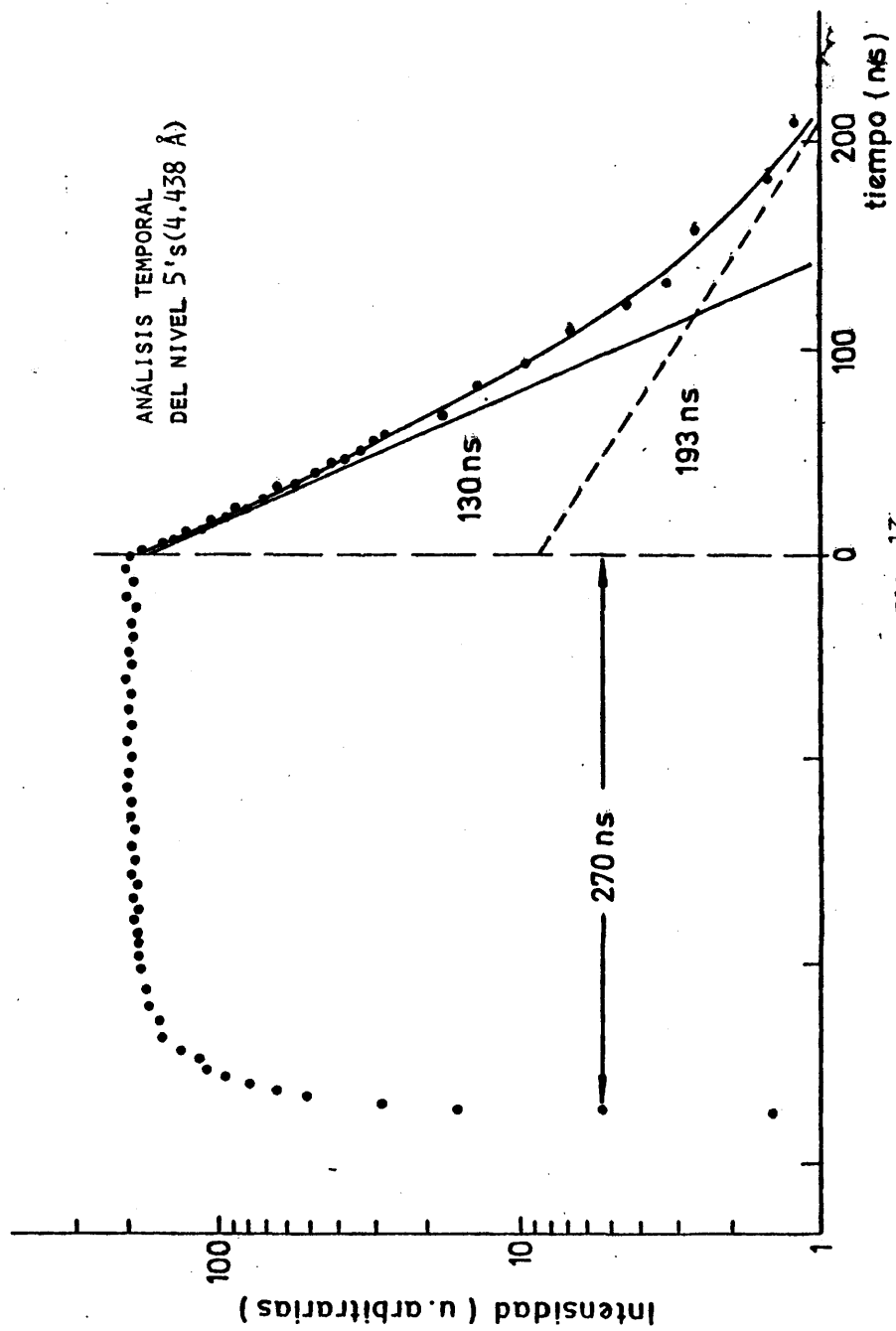


FIG. 13

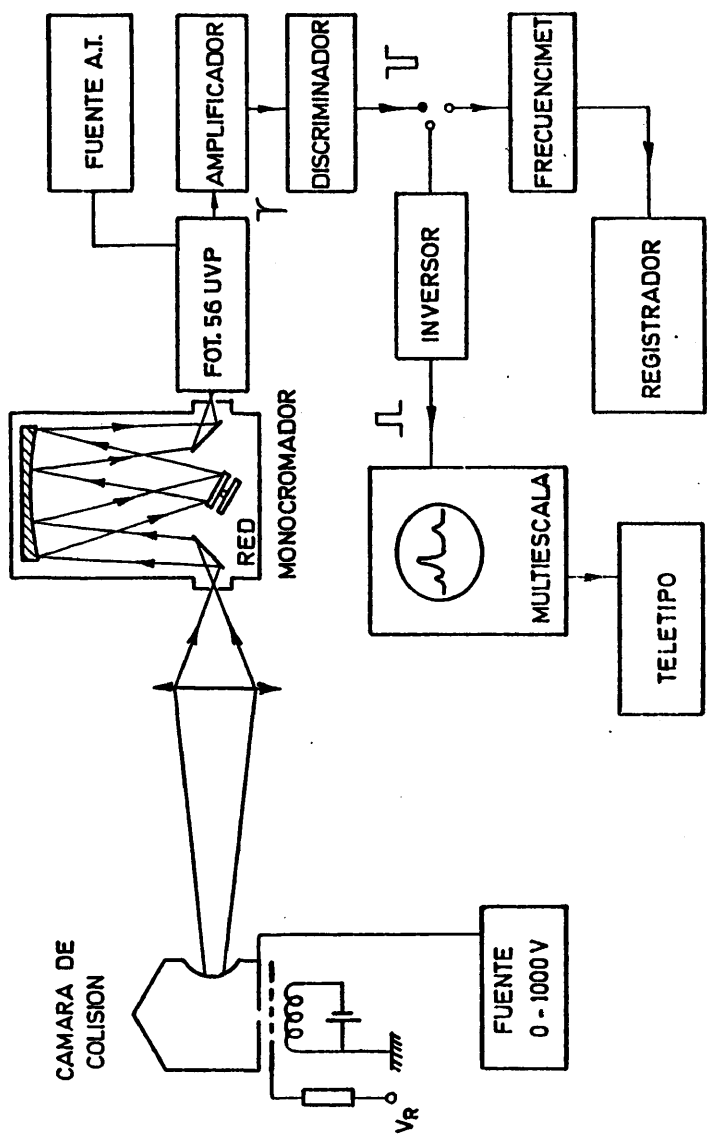


DIAGRAMA BLOQUE DEL DISPOSITIVO DE MEDIDA DE INTENSIDADES RELATIVAS

Fig. 14

de 150 eV, suficientemente baja para que no aparezcan efectos de ionización ni se superpongan otros efectos. La corriente de emisión era del orden de 15 μ A en el ánodo. El intervalo de longitudes de onda medido fue de 3000 Å a 5000 Å, rango de longitudes de onda donde se encontraban la mayoría de las bandas que interesaba estudiar. Se hizo un barrido de todo el espectro seleccionado mediante un motor demultiplicado aplicado al sistema de la red del monocromador. Cuando se utilizó el analizador, en cuya memoria se almacenó la respuesta del fotomultiplicador, se llevó su salida a un calculador HP9866A que es capaz de dibujar el espectro punto a punto mediante un registrador y de integrar el área de cada banda almacenada.

En el caso en que la anchura de la banda era inferior al perfil instrumental, se utilizó el frecuencímetro y el registrador. Como los picos del espectro eran muy regulares y las semi anchuras eran iguales, fue suficiente medir las alturas para conocer el valor de las intensidades relativas.

1.3.2.- Parámetros deducidos

Las intensidades relativas de las bandas moleculares de un espectro se relacionan con las probabilidades de transición entre dos niveles vibracionales v' , v'' , por:

$$I_{v',v''} = K N_{v'} A_{v',v''}$$

en donde K es una constante de proporcionalidad, $I_{v',v''}$ se expresa en función del número de fotones. s^{-1} , $N_{v'}$ es la población del nivel de partida.

$A_{v',v''}$ la probabilidad de transición entre dos niveles vibracionales, viene expresado según la notación de Nicholls (21) en la forma

$$A_{v',v''} = \frac{64\pi^4}{3h} \frac{S_{v',v''}}{g_{v'} \lambda_{v',v''}^3} \quad (1.28)$$

donde

$$S_{v',v''} = R^2(\vec{r}_{v',v''})q(v',v'')$$

es la fuerza de la transición. $g_{v'}$ = degeneración del nivel excitado v' . $q_{v',v''}$ = factor de Franck-Condon de la transición. $\lambda_{v',v''}$ = longitud de onda correspondiente. $R(\vec{r}_{v',v''})$ = momento de transición electrónica. $\vec{r}_{v',v''}$ = r-centroide de la banda, el cual se define como

$$\frac{\int \psi_{v'}^* r \psi_{v''} dr}{\int \psi_{v'}^* \psi_{v''} dr}$$

Siendo $\psi_{v'}$ y $\psi_{v''}$ las funciones de onda vibracionales de los niveles superior e inferior de una transición, respectivamente (22). (1.28) quedaría entonces de la forma

$$A_{v',v''} = \frac{64\pi^4}{3h} \frac{q_{v',v''}}{\lambda_{v',v''}^3} \frac{R^2}{g_{v'}}$$

R depende muy ligeramente de la distancia internuclear r y en muchos casos, como el nuestro, se puede considerar constante.

La relación de intensidades entre dos transiciones que parten de un mismo nivel vibracional será:

$$\frac{I_{v',v''}}{I_{v',u}} = \frac{q_{v',v''}}{q_{v',u}} \cdot \frac{\lambda_{v',u}^3}{\lambda_{v',v''}^3} \quad (1.29)$$

La vida media de un nivel molecular excitado, viene dado igual que en el caso de los átomos, por:

$$\frac{1}{\tau_{v'}} = \sum_{v''} A_{v',v''}$$

Por lo tanto conociendo las vidas medias de los niveles y las in

tensidades relativas pueden obtenerse las razones de ramificación, definidas por

$$R_{v'v''} = \frac{A_{v'v''}}{\sum_{v''} A_{v'v''}} = \frac{I_{v'v''}}{\sum_{v''} I_{v'v''}} \quad (1.30)$$

También podemos obtener las probabilidades de transición absolutas según la expresión:

$$A_{v'v''} = \frac{I_{v'v''}}{\sum_{v''} I_{v'v''}} \cdot \frac{1}{\tau_{v'}}$$

Solo a partir de datos experimentales.

En nuestro trabajo se han calculado las razones de ramificación a partir de las medidas de las intensidades relativas, aplicando (1.30).

Estos valores obtenidos se han comparado con los valores teóricos hallados a partir de los factores de Franck-Condon.

Los factores de Franck-Condon para moléculas diatómicas y en particular para el nitrógeno, están tabuladas por Bates (23) y Nicholls (24).

De (1.29) y (1.30) podemos deducir la expresión

$$R_{v'v''} = \frac{q_{v'v''}/\lambda_{v'v''}^3}{\sum_{v''} \frac{q_{v'v''}}{\lambda_{v'v''}^3}} \quad (1.31)$$

Para el nivel v' . Con ella obtenemos las razones de ramificación teóricas para los niveles en estudio del N_2 y N_2^+ .

Si estos valores obtenidos aplicando la ecuación (1.31) están de acuerdo con los resultados de la ec. (1.30) obtenidos a partir de la determinación experimental de las intensidades re-

lativas, se confirmaría la hipótesis que se hizo de que el momento de transición electrónica R es aproximadamente constante.

En el siguiente capítulo se mostrarán los resultados obtenidos y la comprobación de dicha hipótesis.

1.3.3.- Correcciones

Los factores correctivos que se aplicaron en el caso de la medida de secciones eficaces, son los mismos que deben aplicarse en la medida de intensidades relativas. Las medidas obtenidas de la intensidad luminosa deben corregirse por la eficiencia del sistema óptico, así como por el diferente perfil instrumental que tenga cada banda.

Los procesos secundarios que puedan tener lugar en la excitación de moléculas por impacto de electrones tienen también mucha importancia en la medida de intensidades relativas, ya que estos falsean la medida. Para evitar estos procesos secundarios que se estudiaron en (1.2.3) se tuvo cuidado en trabajar a presiones y corrientes suficientemente bajas para que dichos efectos puedan ser despreciables.

Sucede a veces que cuando hay poca resolución las cabezas de las bandas se solapan unas con otras. Esto impide determinar la anchura de la banda correspondiente y puede dar lugar a error en la medida.

En el caso de las bandas del "primer sistema negativo" del N_2^+ algunas están solapadas con las del "segundo sistema positivo" del N_2 o bien con bandas del mismo sistema.

Por ejemplo la banda (1.0) del "primer sistema negativo" del N_2^+ se solapa con la (0.1) del "segundo sistema positivo" del N_2 pues ellas tienen longitudes de onda de 3.582 \AA y 3.576 \AA .

respectivamente. También ocurre con las $(0.0)(3.914 \text{ \AA})$ y la $(1.1)(3.884 \text{ \AA})$ del 'primer sistema negativo' del N_2^+ .

Para corregir el solapamiento de las bandas adyacentes, es necesario conseguir una mejor resolución para poder restar a una banda la contribución de la otra. En este trabajo se puso una rendija en el monocromador estrecha, de 100μ , con lo que se obtuvo una resolución de 3 \AA y pudieron separarse las bandas. Se midieron sus áreas en el analizador, que como dijimos en (1.3.1) acumula en la memoria la respuesta del fotomultiplicador y puede integrarse el área de la banda. Conocida el área de cada banda solapada puede obtenerse la relación entre ellas y saberse la proporción en que están sus intensidades.

Supongamos que son A_1' y A_2' las áreas de las dos bandas separadas mediante la rendija estrecha E y sean A_1 y A_2 las áreas de las mismas bandas cuando estaban solapadas vistas por el monocromador con la rendija habitual en que se están realizando las medidas.

La relación entre las áreas de las bandas $A_1'/A_2' = a$, será la misma independientemente de la rendija, $A_1/A_2 = a$; y siendo A la suma de las bandas solapadas, puede conocerse fácilmente las relaciones de A_1 y A_2 .

Por este procedimiento se han separado algunas de las bandas que se encontraron solapadas al medir sus anchuras de banda.

Otro método que se utiliza habitualmente es calcular las intensidades relativas de dos bandas procedentes del mismo nivel superior, por medio de las razones de ramificación y los factores de Franck-Condon. La relación existente entre las intensidades de esas bandas será la misma que la razón entre las áreas solapadas.

CAPITULO II

RESULTADOS OBTENIDOS PARA LA MOLECULA DE NITROGENO

El conocimiento de las secciones eficaces de excitación del nitrógeno es de importancia para el estudio de los fenómenos astrofísicos y atmosféricos y recientemente se ha incrementado la investigación por su aplicación en física de plasmas.

El interés fundamental de nuestras medidas radica en la comprobación exhaustiva del buen funcionamiento de nuestro sistema de medida y del propio método experimental, que nos permita abordar con seguridad posteriores medidas de secciones eficaces de excitación en otros gases de los que existan menos resultados y por lo tanto con peores señales de referencia.

Dos sistemas de bandas intensos arrancan de las transiciones entre estados triplete: El "Segundo Sistema Positivo", llamado así porque muestra un aumento en la intensidad del espectro de luz emitido desde la columna positiva de un tubo de descarga de nitrógeno, y el "Primer Sistema Negativo" porque aparece intensamente en el espectro de la columna negativa del tubo de descarga. El segundo sistema positivo viene desde transiciones entre los niveles vibracionales de los estados electrónicos $B^3\Pi_g$ al $C^3\Pi_u$ de la molécula de nitrógeno. El primer sistema negativo proviene de transiciones entre los niveles vibracionales de los estados electrónicos $B^2\Sigma_u^+$ y $X^2\Sigma_g^+$ del ión. En este último sistema hay pocas bandas y están degradadas hacia el infrarrojo.

En la Fig. (15), (16) se muestran los espectros de los dos

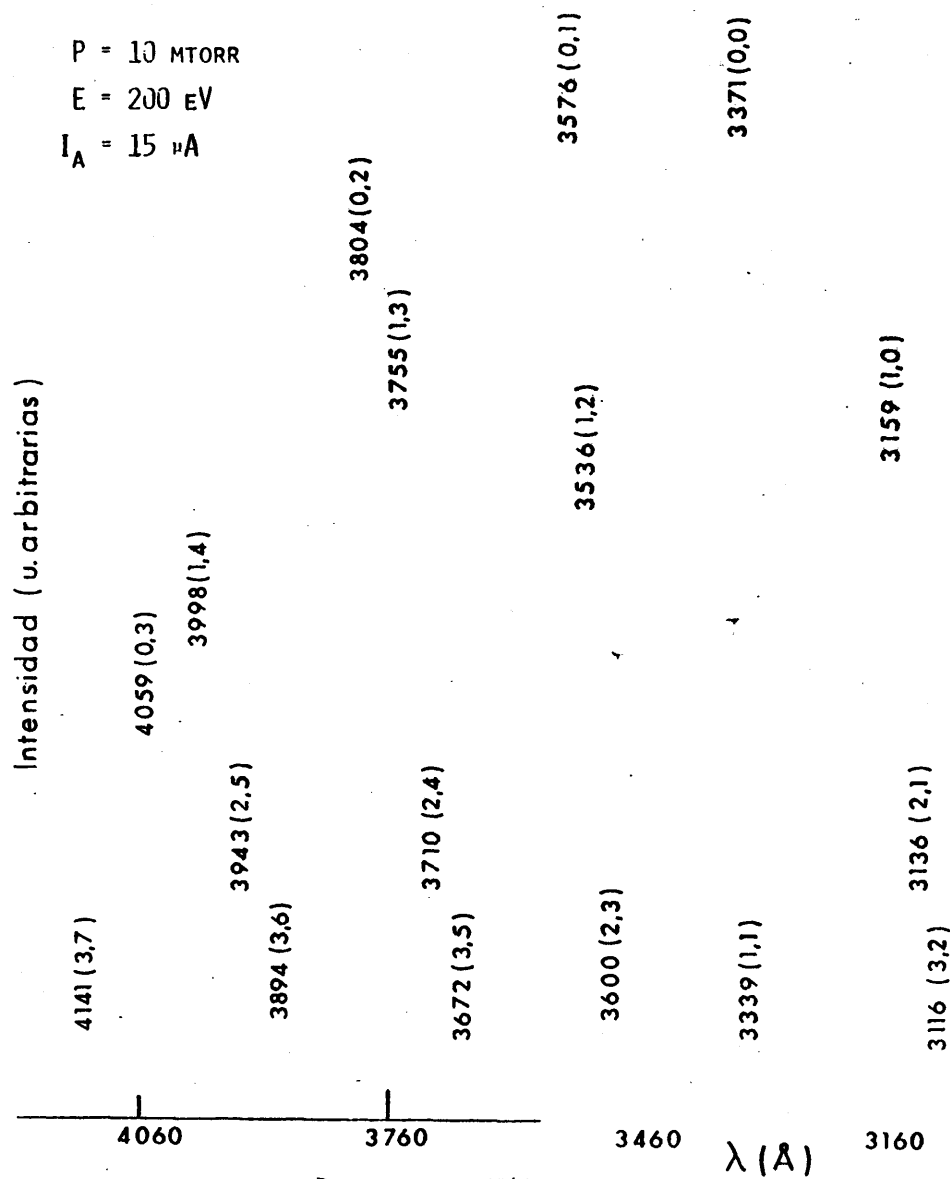


FIG. 15

ESPECTRO DEL H_2 . SEGUNDO SISTEMA POSITIVO ($C^3\Pi_U + B^3\Pi_G$).

Intensidad (u.arbitrarias)

ESPECTRO DEL N_2^+
PRIMER SISTEMA NEGATIVO
 $B^2_{\Sigma^+} + \Sigma^2_{\Sigma^+} \times \Sigma^2_{\Sigma^+} G$

E = 200 eV
P = 10 MTORR
 $I_A = 20 \mu A$

4278 (0.1)

4709 (0.2)

4236 (1.2)

3884 (1.1)

$\lambda (\text{\AA})$

Fig. 16

55

3914 (0.

sistemas de bandas que se estudian, obtenidos con nuestro dispositivo experimental.

En la Fig. (17) se muestra el diagrama de niveles de energía de N_2 y N_2^+ . El perfil de las bandas del N_2^+ (Primer Sistema Negativo), presenta un pico alto seguido de picos más pequeños decrecientes formados por muchas líneas rotacionales.

Las secciones eficaces de excitación por impacto de electrones de estos dos sistemas de bandas han sido medidos por diferentes autores (25),(26),(27),(28),(29). En nuestra experiencia hemos utilizado el método descrito en el capítulo I habiendo sido repetidas las medidas hasta conseguir una buena precisión estadística.

II.1.- MEDIDAS REALIZADAS EN LA MOLECULA NEUTRA: SEGUNDO SISTEMA POSITIVO. TRANSICION $C^3\Pi_u - B^3\Pi_g$.

Como se observa en el diagrama de niveles de la Fig. (17), la única transición permitida desde el estado $C^3\Pi_u$ de la molécula neutra es la que va al estado $B^3\Pi_g$ que constituye el segundo sistema positivo. Otras transiciones al estado más bajo $A^3\Sigma_u^+$ y al estado fundamental $X^1\Sigma_g^+$ están prohibidas por las reglas de selección (25). Por lo tanto en este sentido no se presentarán problemas de atrape radiativo con la consiguiente repoblación del nivel inicial. Tampoco parece posible la población por cascadas de niveles superiores.

II.1.1.- Medida de intensidades relativas

Se han medido las intensidades relativas de las bandas del Segundo Sistema Positivo por el método descrito en (I.3). Se han realizado las medidas en un rango de presiones desde 1 a 10 mtorr y se aceleraron los electrones con una energía de 15eV.

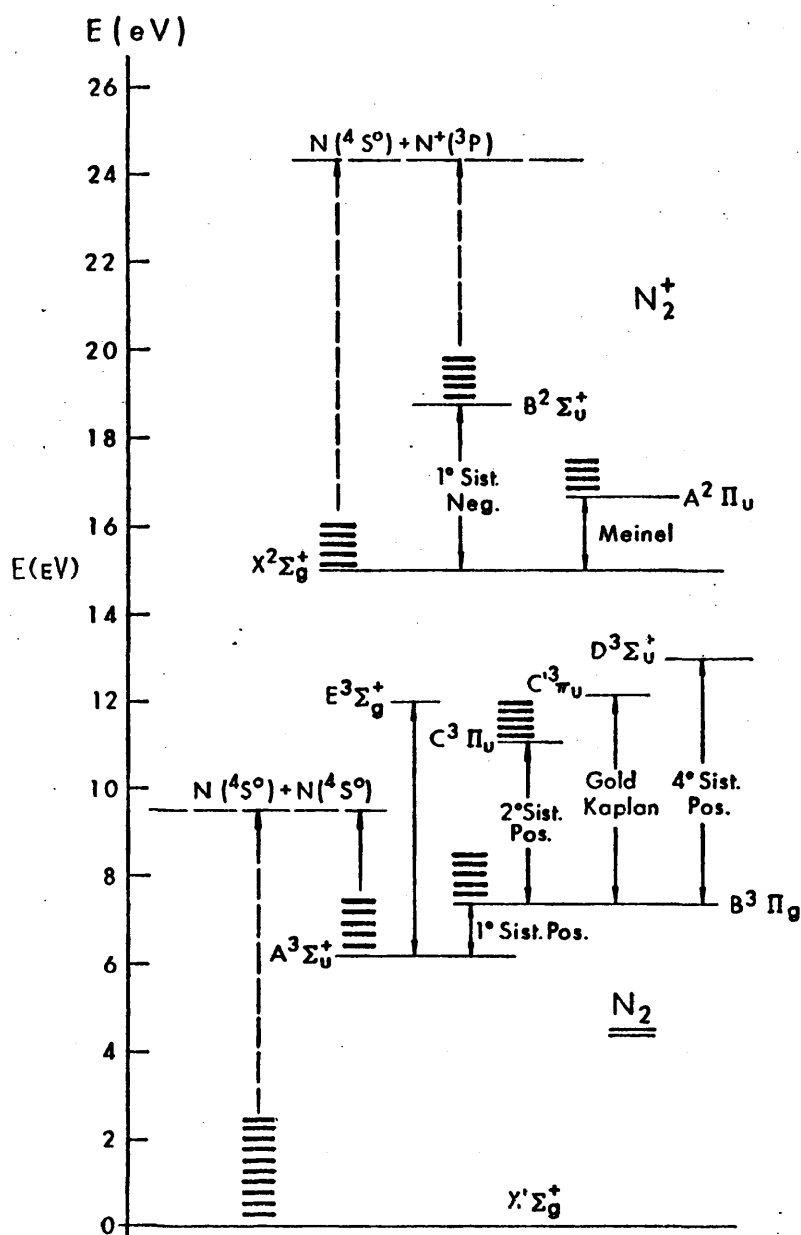


FIG. 17

DIAGRAMA DE NIVELES DE ENERGÍA DE LA MOLÉCULA DE NITRÓGENO.

Se han identificado las bandas con la ayuda de las tablas de Gaydon y Pearse (53), los espectros se muestran en la Fig. (15).

Para poder realizar una comparación se han normalizado todas las intensidades dando a la transición (0.1) el valor de 10. El rango de longitudes de onda medido fue de 3000 Å a 5000 Å por lo que fue necesario utilizar el sistema óptico visible y el ultravioleta, porque ninguno de ellos cubría todo el rango de medida.

En la Tabla I se muestran los resultados obtenidos con los dos sistemas ópticos ultravioleta y visible, así como el valor medio de ambos en los casos de las transiciones que son medidas con los dos sistemas.

En la Tabla II se presentan los resultados obtenidos comparados con los de otros autores (25), (26) y (27). Del examen de la Tabla II puede observarse que existen algunas discrepancias entre las medidas de unos autores a otros. Realmente hay que tener en cuenta que la calibración exacta del sistema óptico es difícil sobre todo si el margen de longitudes de onda es amplio. Los valores del presente trabajo no presentan desviaciones sistemáticas frente a los de los autores mencionados.

El error experimental de las intensidades de la Tabla II se estima en $\pm 10\%$.

II.1.1.1.- Razones de ramificación

A partir del conocimiento de los factores de Franck-Condon y las longitudes de onda correspondientes a cada transición, aplicando la ec. (I.31) pueden obtenerse los valores de las razones de ramificación $\beta_{v,v'}$ teóricas de las bandas en estudio.

TABLA I

Intensidad relativa de las bandas del
Segundo Sistema Positivo

$v'-v''$	λ (Å)	I (sist.visible)	I (sist.ultravioleta)	I Valor medio
0-0	3.371	-	17.10	-
0-1	3.576	10	10	-
0-2	3.804	3.42	4.08	3.75
0-3	4.059	0.98	1.2	1.09
0-4	4.343	0.23	-	-
0-5	4.667	0.05	-	-
1-0	3.159	-	11.74	-
1-1	3.339	-	0.56	-
1-2	3.536	4.31	4.70	4.50
1-3	3.755	2.78	3.50	3.14
1-4	3.998	1.29	1.64	1.46
1-5	4.269	0.43	-	-
1-6	4.574	0.12	-	-
1-7	4.916	0.03	-	-
2-0	2.976	-	1.93	-
2-1	3.136	-	3.94	-
2-2	3.309	-	0.31	-
2-3	3.500	0.56	0.54	0.55
2-4	3.710	1.04	1.19	1.12
2-5	3.943	0.70	0.82	0.76
2-6	4.200	0.33	0.31	0.32
2-7	4.490	0.11	-	-
2-8	4.814	0.03	-	-
3-2	3.116	-	0.86	-
3-3	3.285	-	0.34	-
3-4	3.469	-	-	-
3-5	3.671	0.20	0.21	0.21
3-6	3.894	0.22	0.23	0.23
3-7	4.141	0.13	0.15	0.14
3-8	4.416	0.06	-	-

TABLA II

Intensidad relativa de las bandas del
Segundo Sistema Positivo

$v'-v''$	λ (Å)	(25)	(26)	(27)	Este trabajo (error $\pm 10\%$)
0-0	3.371	15.5	12.7	18.9	17.1
0-1	3.576	10	10	10	10
0-2	3.804	3.55	5.1	3.81	3.75
0-3	4.059	1.56	1.4	0.81	1.09
0-4	4.343	0.25	0.4	-	0.23
0-5	4.667	-	0.14	-	0.05
1-0	3.159	8.55	10.1	-	11.74
1-1	3.339	0.46	0.58	-	0.56
1-2	3.536	3.76	3.6	4.0	4.50
1-3	3.755	3.39	3.6	2.94	3.14
1-4	3.998	1.85	2.58	1.55	1.46
1-5	4.269	0.64	0.70	-	0.43
1-6	4.574	0.14	0.30	-	0.12
1-7	4.916	-	0.14	-	0.03
2-0	2.976	1.0	1.29	-	1.93
2-1	3.136	2.5	3.76	-	3.94
2-2	3.309	0.23	0.23	-	0.31
2-3	3.500	0.38	0.41	-	0.55
2-4	3.710	0.96	1.17	-	1.12
2-5	3.943	0.79	1.17	-	0.76
2-6	4.200	0.35	0.51	-	0.32
2-7	4.290	0.12	0.24	-	0.11
2-8	4.814	-	0.16	-	0.03

Igualmente aplicando la ec.(I.30) pueden calcularse estas mismas razones de ramificación a partir de las intensidades relativas experimentales obtenidas en el Laboratorio. Por ser los cálculos teóricos independientes del método de medida utilizado, nos sirve de guía y comprobación.

En la Tabla III se muestran las razones de ramificación de los niveles vibracionales del estado $C^3\Pi_g$. Los factores de Franck-Condon son los obtenidos por Nicholls (21). Se comparan los valores teóricos (a) con los experimentales (b).

Se puede observar que hay acuerdo entre ellos, lo que representa una buena demostración de la hipótesis que se enunció en I.3.2 de que el momento de transición electrónica es aproximadamente constante e independiente de la distancia internuclear. Los valores obtenidos para $v'' > 5$ presentan mayores diferencias debido a que la emisión es más débil y los errores cometidos son mayores.

II.1.2.- Medida de secciones eficaces de excitación

El método utilizado para hallar las secciones eficaces de excitación de los niveles vibracionales, consistió en medir la sección eficaz de un nivel y a partir de las intensidades relativas, calcular las demás.

De los niveles vibracionales del Segundo Sistema Positivo, se eligió el nivel (0.2) porque parecía una banda bien definida, separada de las demás y con una intensidad suficiente para ser comparada con la del nivel 5'S del Helio.

Se midió la función de excitación de la transición (0.2) que corresponde en la longitud de onda de 3.804 \AA , a la presión de 2 mtorr.

TABLA III

Razones de ramificación del estado $C^3\Pi_u$ ($\times 100$)

v'/v''	0	1	2	3	4	5	6	7	8
0 (a)	51.9	31.8	11.7	3.45	0.89	0.20			
(b)	53.1	31	11.6	3.4	0.7	0.16			
1 (a)	51.8	2.1	19.3	15.8	7.3	2.6	0.78	0.2	
(b)	53	2.5	20.4	14.3	6.6	1.96	0.55	0.14	
2 (a)	20.5	41.7	3.6	5.5	12.6	9.3	4.5	1.7	0.56
(b)	21.3	43.4	3.4	6.0	12.3	8.4	3.5	1.21	0.33

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{(a) } \beta_{(v'v'')}_{\text{teór.}} = q_{v'v''} \cdot \lambda_{v'v''}^{-3} / \sum_{v''} q_{v'v''} \cdot \lambda_{v'v''}^{-3} \\ \text{(b) } \beta_{(v'v'')}_{\text{exp.}} = \frac{I_{v'v''}}{\sum_{v''} I_{v'v''}} \end{array} \right.$$

En la Fig. (18) se muestra la variación de la sección eficaz en función de la energía de los electrones. Como corresponden a las funciones de excitación de los niveles vibracionales de este estado electrónico $C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$, las curvas tienen un máximo alrededor de los 15 eV con una pendiente muy rápida al principio y mucho más lenta después.

En la Fig. (19) se muestran las funciones de excitación para el nivel (0,0), (3.371 Å) obtenidas por varios autores y la obtenida en este trabajo, a 2 mtorr.

Como se vio en I.2.1 manteniendo todos los factores geométricos constantes y realizando las medidas de la intensidad luminosa de los niveles de dos transiciones distintas en idénticas condiciones, se puede aplicar la ec. (I.12)

$$\sigma_{ij} = \frac{E'(\lambda')}{E(\lambda)} \cdot \frac{Q'}{Q} \cdot \frac{m}{m'} \cdot \sigma'_{i'j'}$$

en donde σ_{ij} es la sección eficaz de la línea en estudio y $\sigma'_{i'j'}$ es la sección eficaz de excitación de la línea 5'S del He.

Con el dispositivo de detección en fase se ha comparado la intensidad de la línea de 4.437 Å del Helio (5'S \rightarrow 2'P) con la de la banda de 3.804 Å (0.2) del Segundo Sistema Positivo. En la Fig. 20 se muestran los resultados obtenidos para la banda de 3.804 Å para energías de 100 eV y 20 eV. Las figuras muestran la variación de la intensidad luminosa en función de la presión.

En la Fig. (21) se muestra la correspondiente a las líneas 5'S (4.437 Å), 4'S (5.048 Å) del Helio. Ambas se han medido ajustando una intensidad eléctrica total media igual en todas ellas.

En las líneas del Helio se puede observar que los puntos

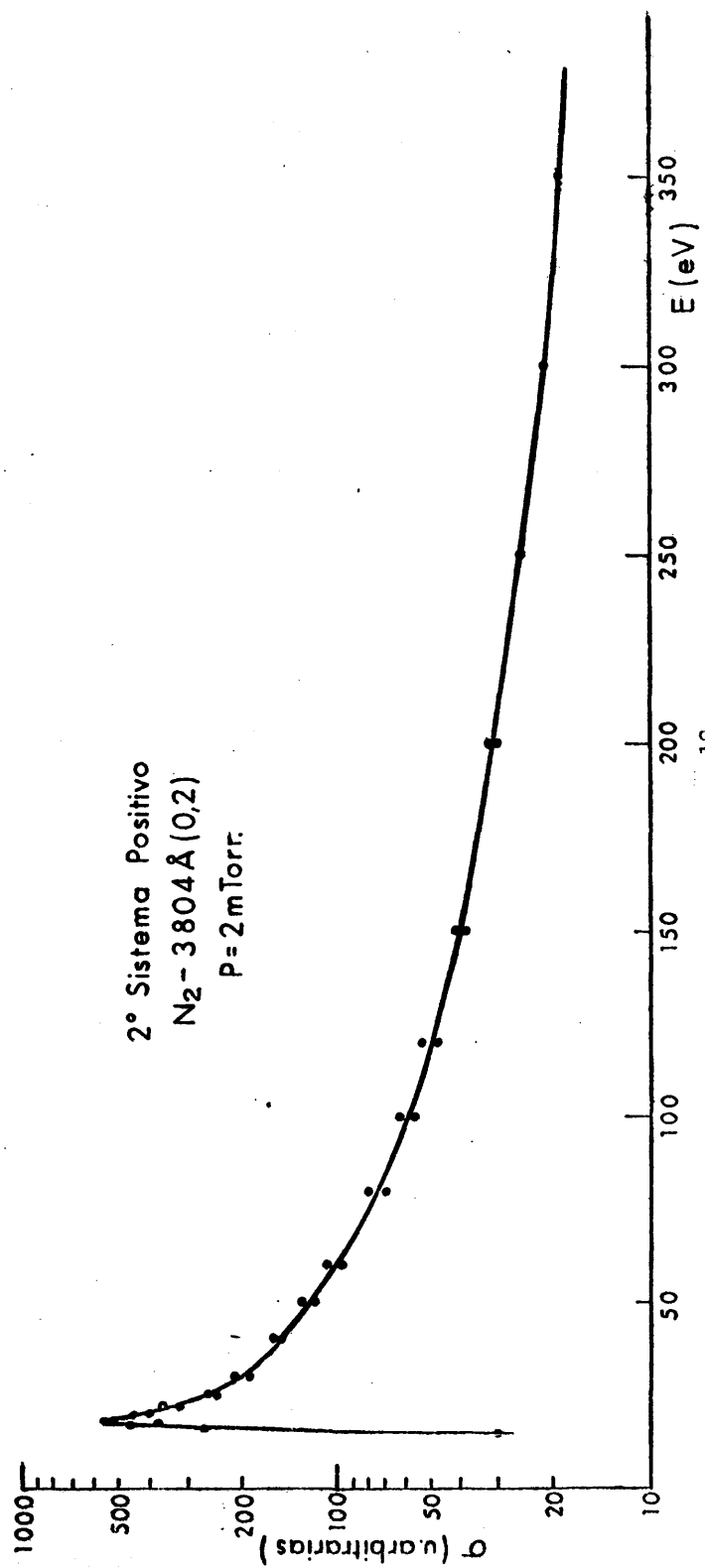


FIG. 13
 FUNCIÓN DE EXCITACIÓN

$N_2 - 3371 \text{ \AA} (0,0)$
 2° Sistema Positivo

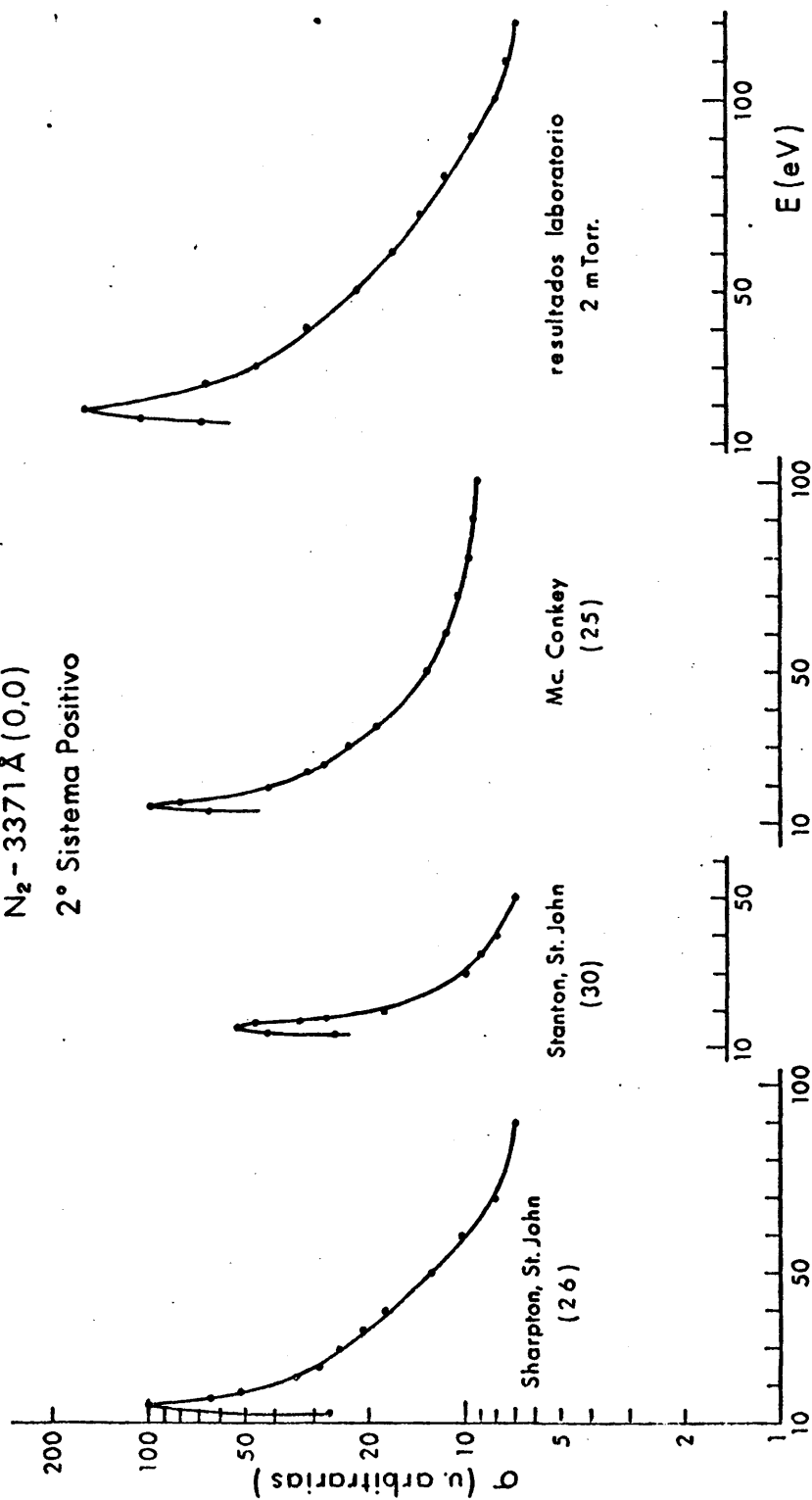


FIG. 19
 FUNCIÓN DE EXCITACIÓN

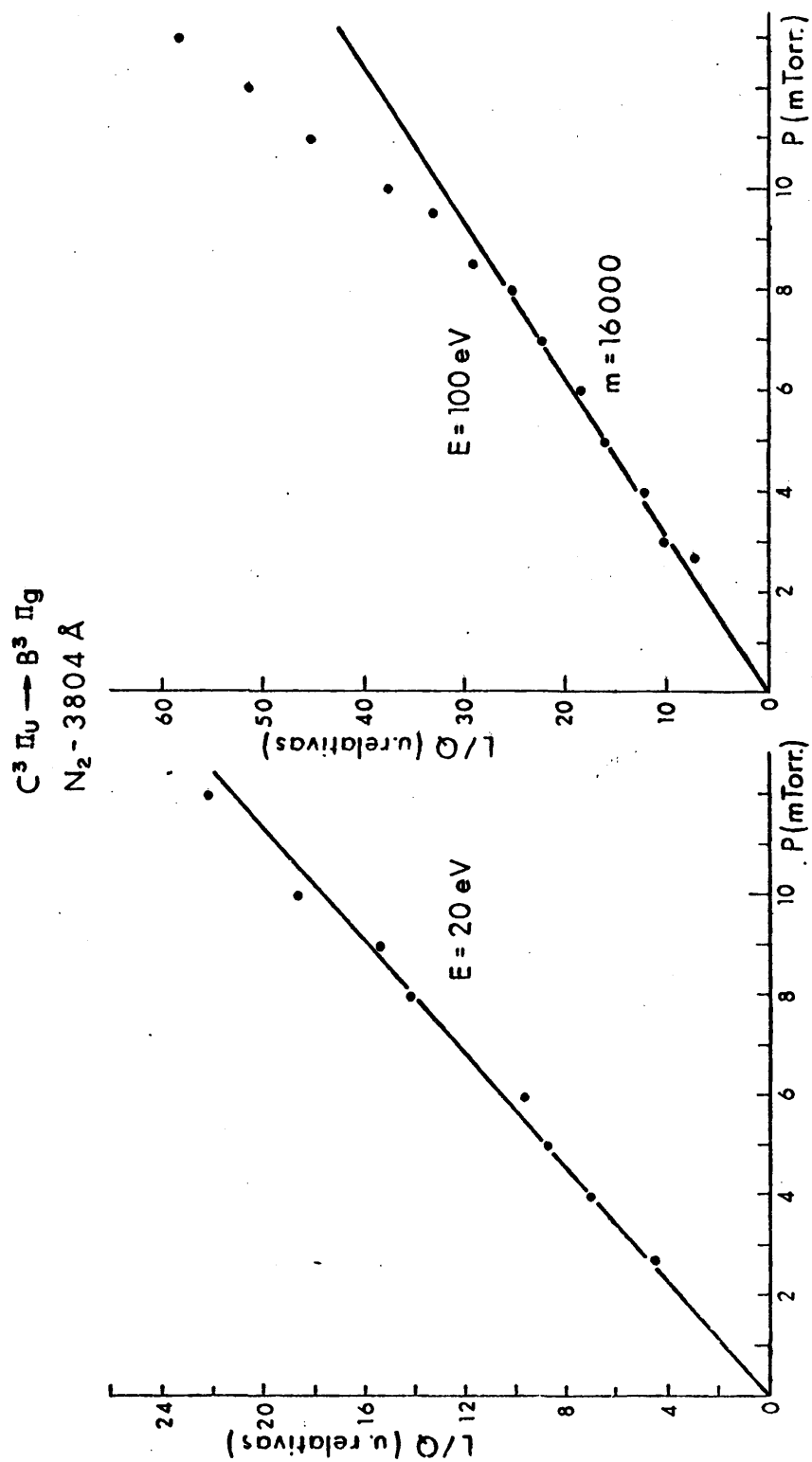


Fig. 20

RELACIÓN INTENSIDAD-PRESIÓN

E = 100 eV Sing ete e

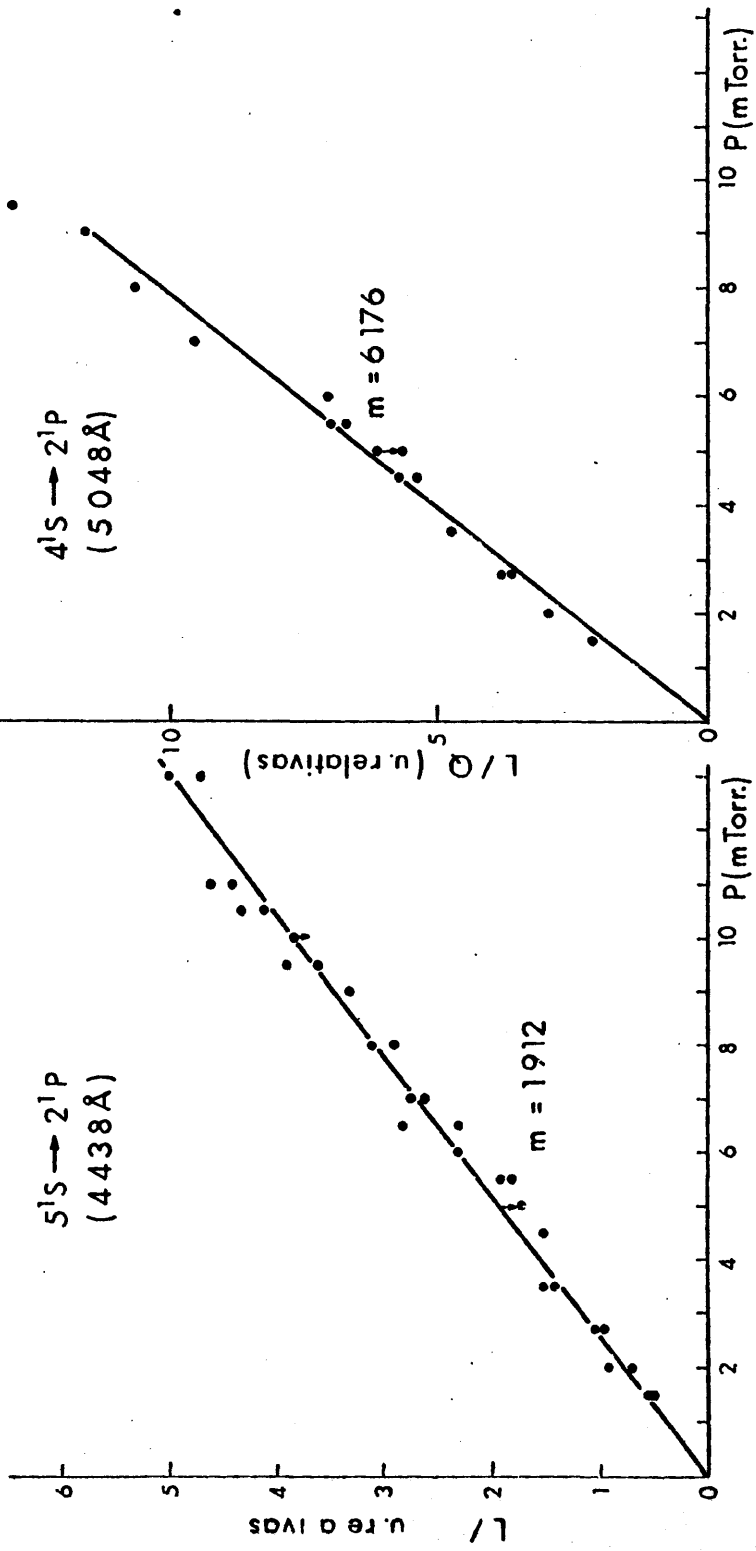


FIG. 21

coinciden prácticamente con una recta que pasa por el origen. En cambio en la banda del N_2 se observa que a partir de 9 mtorr la intensidad no es proporcional a la presión en la curva realizada a 100 eV. Esto nos hace pensar en la existencia de algún proceso secundario que se explica más adelante. Como nos interesa tomar el valor de la intensidad de luz por unidad de presión en situaciones en que no existan problemas de población secundario se traza la pendiente tomando los puntos que se aproximen a una recta, los más próximos al origen.

Al hacer la corrección por la eficiencia de detección hay que tener en cuenta, por una parte la eficiencia del sistema óptico y por otra la diferente anchura espectral que presentan las bandas que se van a comparar.

En la Fig. (22) se muestran los resultados obtenidos de los espectros en el analizador multicanal y se dan los valores de la relación área/intensidad máxima de la banda de 3.804 Å y de la línea de 4.438 Å del Helio.

El valor de la sección eficaz del nivel 5'S del Helio se obtiene a partir de los valores teóricos a 200 eV calculados por la primera aproximación de Born y por la aproximación DWPO. Para este trabajo se ha tomado como valor más fiable el obtenido mediante la aproximación DWPO pues como se vio en (1.2) es más exacto para energías intermedias, en lugar de la primera aproximación de Born que es apropiada para energías altas.

Se ha tomado por lo tanto para el nivel 5'S del Helio el valor de

$$\sigma_{5'S} = 3.2 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ a } 200 \text{ eV}$$

La razón de ramificación de ese nivel para la transición 5'S \rightarrow 2'P tiene un valor $\beta_{1,j} = 0.47$ calculado de las tablas de probabilidades de transición (11), realizadas por Heddler. Por

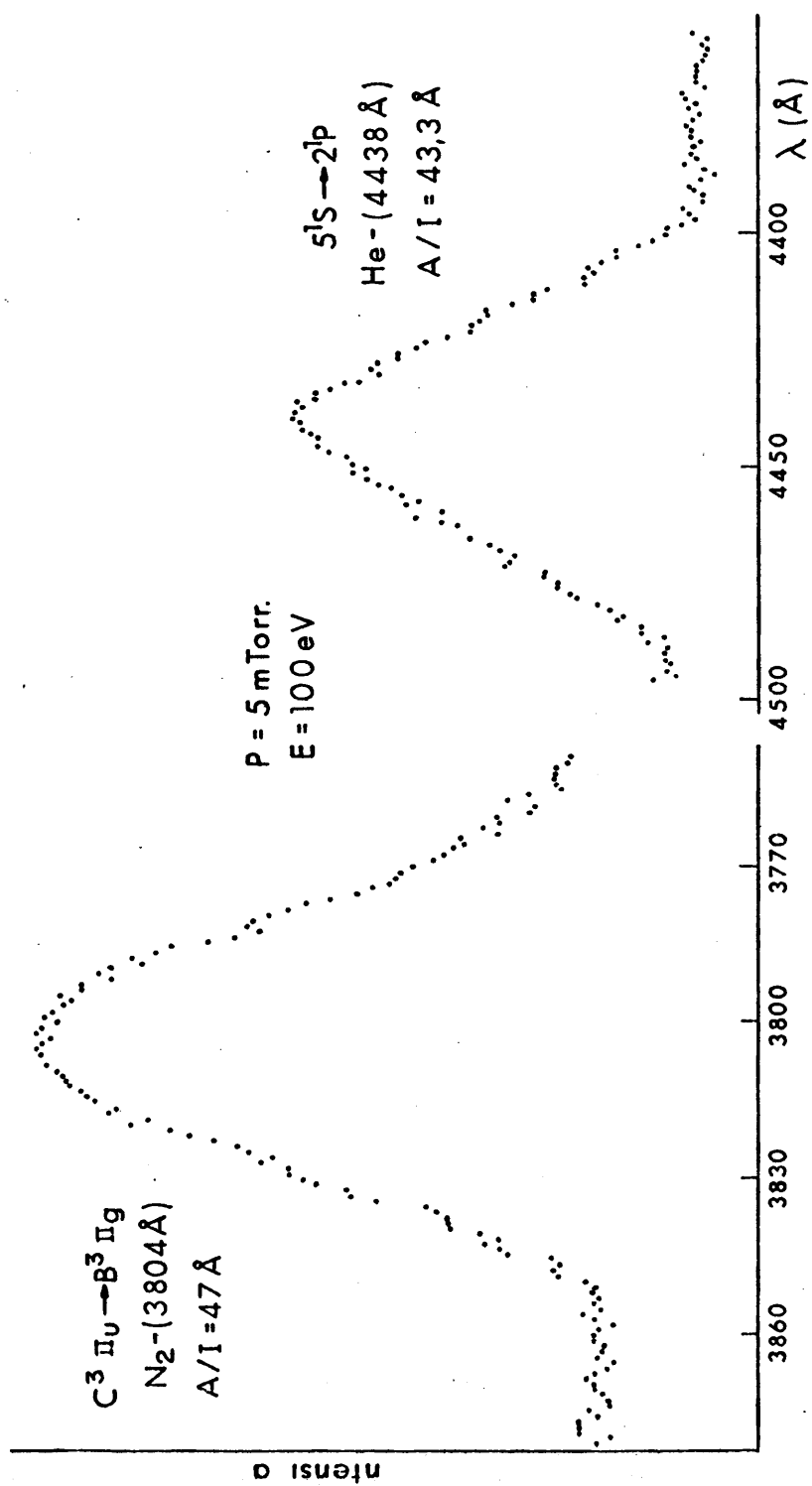


FIG. 22

RELACIÓN $A/I_{\text{MÁX.}}$

lo tanto la sección eficaz de excitación de la transición $5'S - 2'P$ (4.438 \AA) toma el valor de $\sigma_{ij} = 1.5 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$.

A partir de la función de excitación obtenida experimentalmente para este nivel $5'S$, mostrado en la Fig. (23), se calcula el valor de la sección eficaz a 100 eV que es la energía a la cual se compara con las bandas del H_2 . Una vez aplicadas todas las correcciones, puede calcularse el valor de la sección eficaz de excitación de la banda.

En la Tabla IV se muestran los resultados obtenidos de las secciones eficaces de excitación en su valor máximo de las transiciones $C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$ comparadas con los resultados de otros autores.

Teniendo en cuenta los errores cometidos en la calibración de la eficiencia del sistema, medida de la presión, correcciones por procesos secundarios e incertidumbre en el valor de la sección eficaz $\sigma_{5'S}$, se estima que el error total cometido es de un 20%, lo cual se puede considerar bueno, dentro de este tipo de medidas.

II.1.3.- *Discusión*

Del estudio realizado de las intensidades relativas y de las secciones eficaces de excitación mostrados en este capítulo, puede deducirse que salvo algunas discrepancias los resultados concuerdan con algunos autores que han realizado las medidas utilizando el método óptico para la excitación de moléculas por impacto de electrones.

El valor de la sección eficaz de la transición (0.0) que es la más intensa resulta en nuestras medidas un 10% más alto que el de la ref. (25). Las razones de ramificación calculadas teórica y experimentalmente, como puede observarse en la Ta-

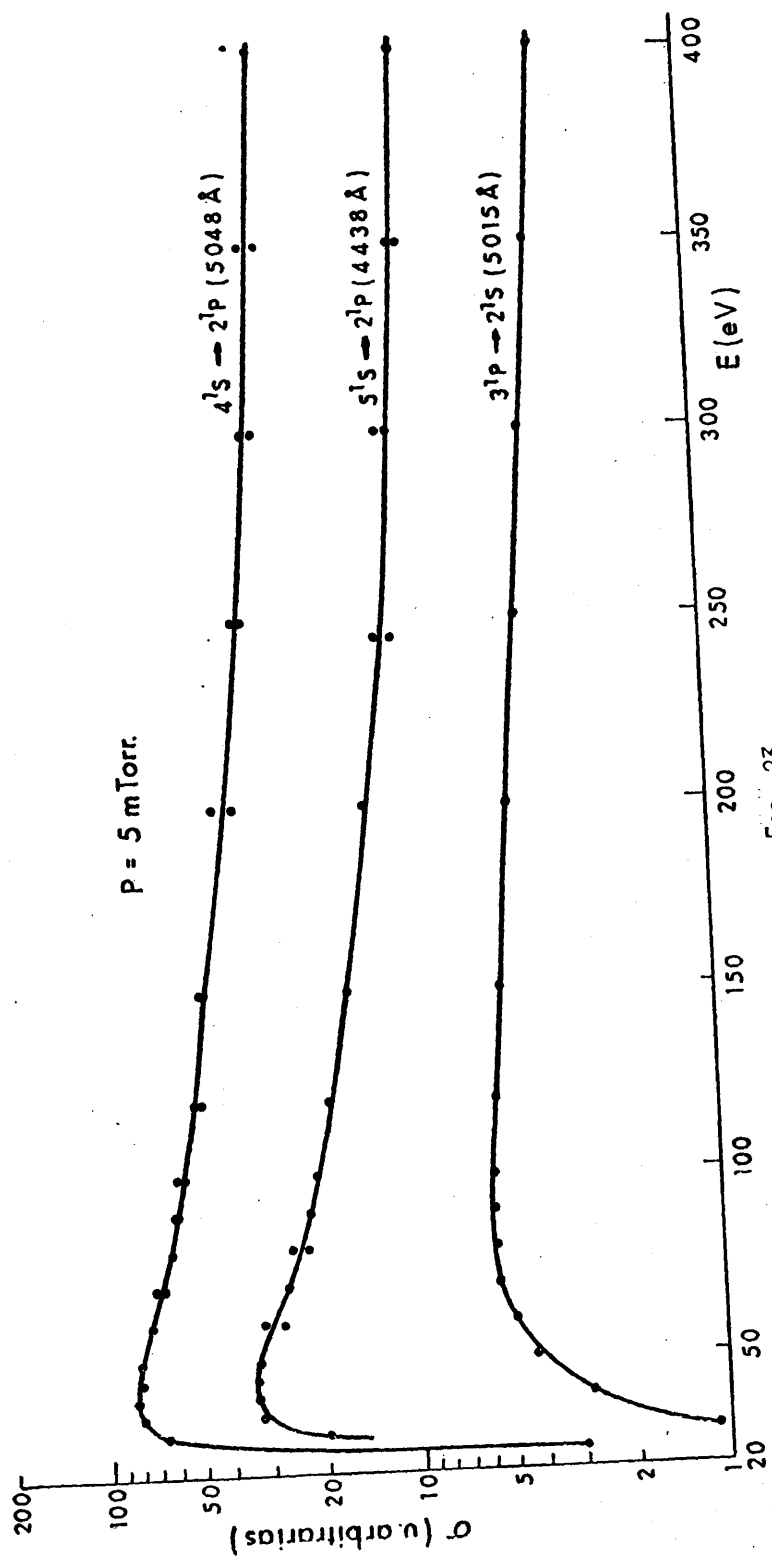


Fig. 23

FUNCIÓN DE EXCITACIÓN SINGLETES HE .

TABLA IV

Secciones eficaces de excitación (valor máximo) de las bandas del Segundo Sistema Positivo, transición $C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$.
($\times 10^{-18} \text{ cm}^2$).

$v'-v''$	$\lambda(\text{\AA})$	(26)	(25)	(29)	(28)	Este trabajo
0-0	3.371	10.8	11.8	6.8	8.12	13.0
0-1	3.576	8.8	7.6	4.3	2.35	7.6
0-2	3.804	4.4	2.7	2.08	0.74	2.87
0-3	4.059	1.2	1.19	0.65	-	0.83
0-4	4.343	0.34	0.19	0.13	-	0.17
0-5	4.667	0.12	-	0.04	-	0.036
1-0	3.159	8.6	6.5	3.7	-	8.95
1-1	3.339	0.5	0.35	0.175	-	0.41
1-2	3.536	3.1	2.87	1.36	1.74	3.29
1-3	3.755	3.1	2.58	1.61	1.94	2.65
1-4	3.998	2.2	1.41	0.82	-	1.25
1-5	4.269	0.6	0.49	0.26	-	0.33
1-6	4.574	0.26	0.11	0.09	-	0.09
1-7	4.916	-	-	-	-	0.023
2-0	2.976	1.1	0.78	0.57	1.94	1.47
2-1	3.136	3.2	1.90	1.10	-	3.0
2-2	3.309	0.20	0.18	0.10	-	0.23
2-3	3.500	0.35	0.29	0.21	-	0.41
2-4	3.710	1.0	0.71	0.51	0.60	0.85
2-5	3.943	1.0	0.60	0.32	-	0.62
2-6	4.200	0.44	0.27	0.17	-	0.23
2-7	4.490	0.21	0.096	0.065	-	0.08
2-8	4.814	-	-	-	-	0.023

Error

Experimental - - 20% 40% - 20%

bla III, estan en muy buen acuerdo entre ellas. Las que más se distancian son los niveles (0.0) y (1.0) pero su diferencia es solamente de un 2.4% que puede considerarse dentro del margen de error que se encuentra normalmente en las medidas.

Los resultados de Stewart y Gabathuler (28) para las secciones eficaces de excitación mostrados en la Tabla IV presentan unos valores en general muy inferiores a los obtenidos por los demás autores. Igualmente los resultados de Skubenich y Zape sochny (29) son muy bajos. Los resultados obtenidos por nosotros están mas de acuerdo con los resultados de los autores de las referencias (25) y (26), los cuales nos ofrecen más confianza por el esmerado trabajo realizado y el detallado estudio de todos los procesos que han llevado a cabo.

En cuanto a la influencia de la presión en la intensidad luminosa puesta de manifiesto en la Fig. (20) a 100 eV se pudo pensar que fuera producido por algún efecto de atrape radiativo o población por colisiones. Se trazó la curva de variación I-p para una energía de los electrones de 20 eV y se observó que se mantenía aproximada a una recta. Esto nos hace rechazar la idea de que fuera producido por iones ya que a 20 eV todavía no se ha producido excitación de la molécula ionizada. El atrape radiativo no debe influir, pues éste no es un nivel resonante y en los casos en que los fotones sean reabsorbidos por el gas, la variación de la pendiente sería en el sentido contrario. Quizá el efecto podría ser debido a electrones secundarios. Burns y colaboradores (21) estudiaron este problema llegando a la conclusión no muy definitiva, de que podría ser debido a población por colisiones desde un nivel cuya energía fuera próxima a la del $C^3\pi$ y de vida media mayor. Probablemente existe más de una causa del hecho anterior que necesitaría de estudios posteriores. No obstante este efecto no introduce ninguna fuente de error en el presente trabajo, puesto que se han efectuado las medidas a presiones bajas.

II.2.- MEDIDAS REALIZADAS EN LA MOLECULA IONIZADA: PRIMER SISTEMA NEGATIVO. TRANSICION $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$

Un modo similar al usado para la molécula neutra, se ha utilizado para estudiar los niveles vibracionales de estas transiciones. La forma del espectro obtenido se muestra en la Fig.(16). Las bandas del Primer Sistema Negativo son las más intensas de los sistemas del N_2^+ .

II.2.1.- Intensidades relativas

Se midieron las intensidades relativas de las bandas del Primer Sistema Negativo por el mismo método descrito en (1.3) en un rango de presiones de 1 a 10 mtorr y se excitaron con electrones de 150 eV de energía.

La anchura de las bandas es mayor que el perfil instrumental, por lo que es necesaria la utilización de la multiescala para calcular las áreas de las bandas.

En la Fig. (24) se muestran los espectros obtenidos en el analizador y las relaciones área/intensidad máxima de las bandas. Se utilizaron rendijas en el monocromador de 500 μ . Con ello se obtenía una buena relación señal-ruido pero en cambio no resolvían bien la forma de las bandas que se solapaban unas con otras. La de 3.884 Å (1.1) se solapa con la de 3.914 Å (0.0). La de 4.236 Å (1.2) se solapa con la de 4.278 Å (0.1) y la de 4.651 Å (1.3) con la banda de 4.709 Å (0.2). Para poderlas separar se utilizó una rendija de 100 μ y se procedió en la forma indicada en (1.3.3).

En la Tabla V se muestran las intensidades relativas para las bandas del Primer Sistema Negativo obtenidas por nosotros y comparadas con otros autores. También se presentan los valores teóricos deducidos. Se ha normalizado a 100 la banda (0.0)(3.914 Å)

$N_2^+ B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$

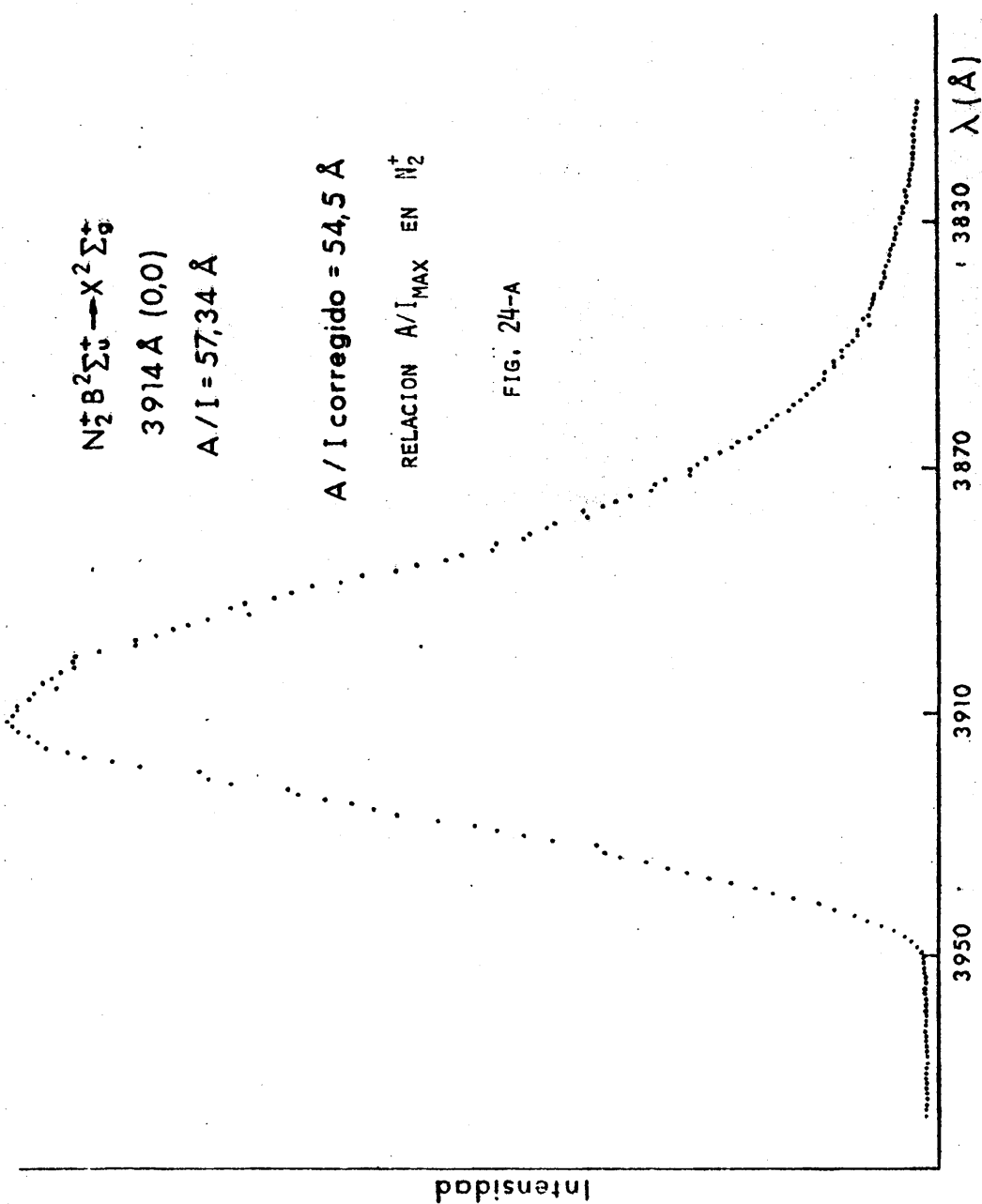
3914 Å (0,0)

A/I = 57,34 Å

A / I corregido = 54,5 Å

RELACION A/I_{MAX} EN N₂⁺

FIG. 24-A



$$\text{N}_2^+ \text{B}^2\Sigma_u^+ \rightarrow \text{X}^2\Sigma_g^+$$

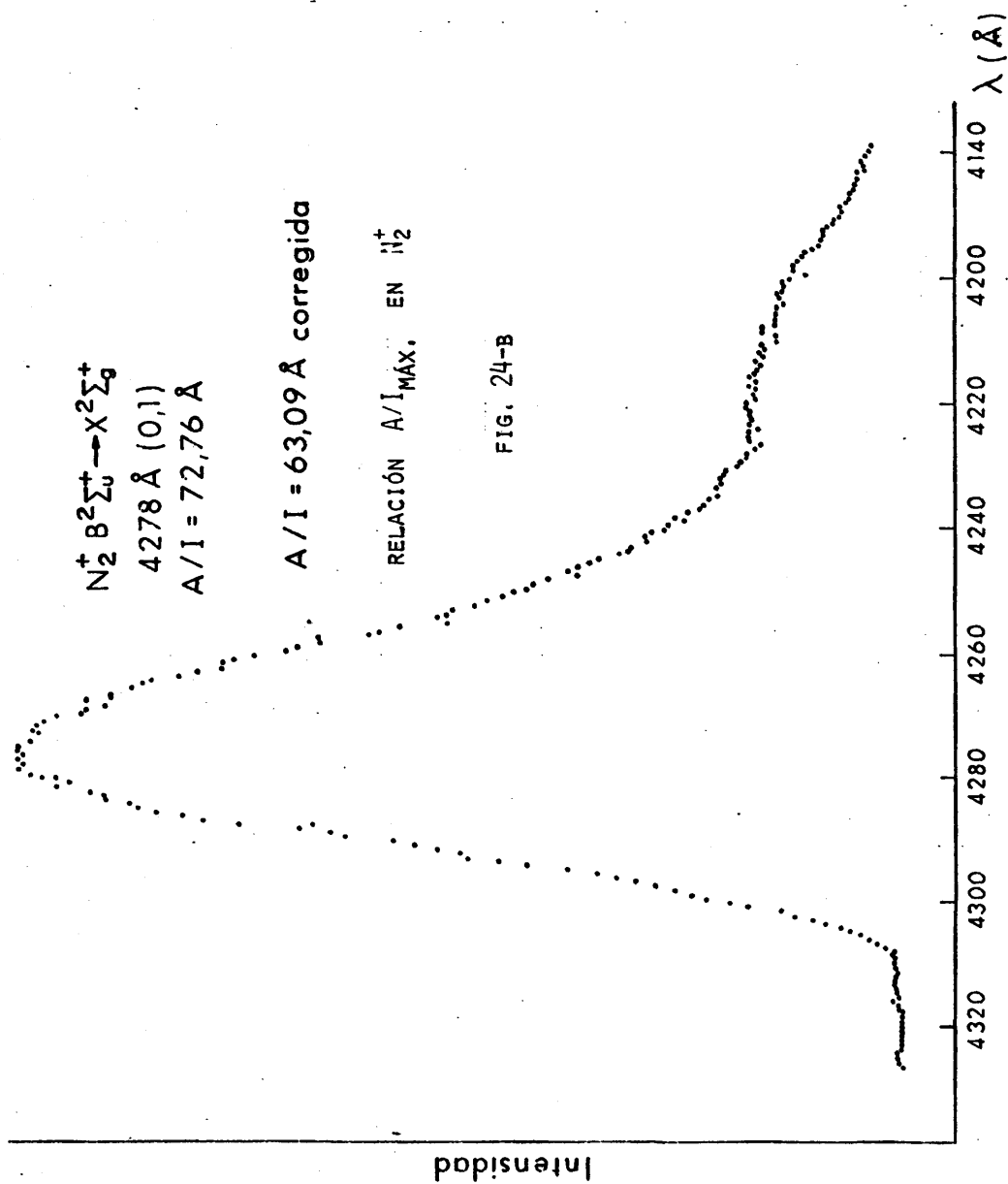
$$4278 \text{ \AA} (0,1)$$

$$A/I = 72,76 \text{ \AA}$$

$$A/I = 63,09 \text{ \AA corregida}$$

$$\text{RELACIÓN } A/I_{\text{MÁX.}} \text{ EN } \text{N}_2^+$$

FIG. 24-B



$N_2^+ B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X'^2\Sigma_g^+$
 4709 Å (0,2)
 A/I = 60,57 Å

RELACIÓN A/I_{MÁX.} EN N₂⁺

FIG. 24-C

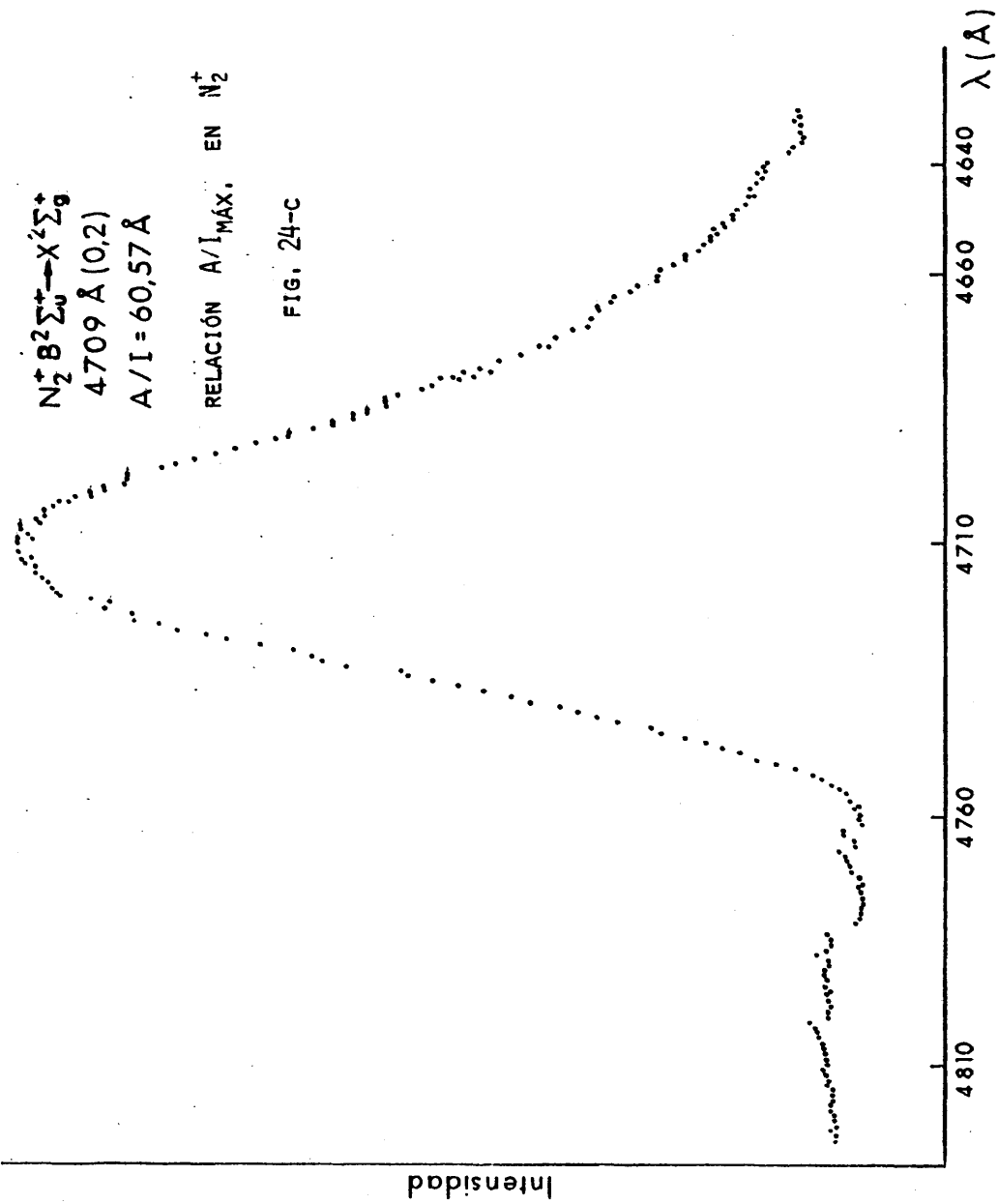


TABLA V

Intensidades relativas de las bandas del Primer Sistema Negativo
($B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$)

$v'-v''$	0-0	0-1	0-2	1-1	1-2	1-3
$\lambda (\text{\AA})$	3.914	4.278	4.709	3.884	4.236	4.651
(30)	100	34.6	7.05	3.9	4.42	1.73
(31)	100	32.	6.0	4.8	4.4	1.4
(22)	100	30.	5.0	4.0	4.0	0.8
(32)	100	32.	7.5	-	-	-
(28)	100	39.	10.	-	-	-
(33)	100	32.	6.3	-	-	-
(34)	100	32.	6.7	-	-	-
(35)	100	34.	6.5	-	-	-
Este						
trabajo	100	34.7	5.35	4.26	5.11	1.48
Teórico	100	30.4	6.2	4.2	4.2	1.4

TABLA VI

Razones de ramificación del estado $B^2\Sigma_u^+$. ($\times 100$). $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$

v'/v''	0	1	2	3	4
0	(a) 72.5	22.1	4.5	0.74	0.1
	(b) 70.	24.3	3.7	-	-
1	(a) 41.6	24.1	23.8	8.3	1.9
	(b) 42.	22.	26	7.6	-

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{(a)} \quad \beta(v'v'')_{\text{teór.}} = \frac{q_{v'v''} \cdot \lambda_{v'v''}^{-3}}{\sum_{v''} q_{v'v''} \cdot \lambda_{v'v''}^{-3}} \\ \text{(b)} \quad \beta(v'v'')_{\text{exp.}} = \frac{I_{v'v''}}{\sum_{v''} I_{v'v''}} \end{array} \right.$$

para poder realizar una comparación entre ellas.

II.2.1.1.- Razones de ramificación

Se han calculado las razones de ramificación teóricas a partir de los factores de Franck-Condon y las longitudes de onda de las transiciones de los estados electrónicos del Primer Sistema Negativo aplicando la ec. (I.31). Se han calculado igualmente las razones de ramificación a partir de las intensidades relativas aplicando la ec. (I.30).

En la Tabla VI se muestran las razones de ramificación de los niveles vibracionales del estado $B^2\Sigma_u^+$ teóricas (a) y experimentales (b).

Cuando no se conocen todos los valores de v'' en una transición hay que aplicar un factor de corrección α a $\beta_{v',v''}$ de manera que

$$\beta_{v',v''} = \frac{I_{v',v''}}{\sum_{u''} I_{v',u''}} \cdot \alpha$$

siendo

$$\alpha = \frac{\sum_{u''} q_{v',u''} \lambda_{v',u''}^{-3}}{\sum_{v''} q_{v',v''} \lambda_{v',v''}^{-3}}$$

donde u son los niveles conocidos.

II.2.2.- MEDIDA DE SECCIONES EFICACES DE EXCITACION

Se trazaron las funciones de excitación para las bandas de (4.278 Å) y (3.914 Å) a presiones de 2 mtorr y 1 mtorr respectivamente.

Ambas presentan un máximo hacia los 100 eV con un descenso al aumentar la energía de los electrones muy lenta. Los resultados se muestran en la Fig. (25), y se observa que son prácticamente iguales, como todos los de este sistema de bandas. Se midieron desde el umbral hasta 400 eV.

Se trazaron las curvas que relacionan la intensidad luminosa con la presión para una misma carga total que pueden verse en la Fig. (26).

Se realizaron las medidas con una energía de los electrones de 100 eV y se midieron hasta una presión de 13 mtorr. se observa que los puntos correspondientes a la banda de 4.278 Å se ajustan bien a una recta que pasa por el origen. En cambio en la 3.914 Å la curva que pasa por el origen se ajusta a una recta hasta 6 mtorr. A partir de 7 mtorr va subiendo lentamente apartándose de la linealidad. Este efecto dependiente de la presión está ocasionado por efectos de colisiones entre las moléculas.

Aplicando los métodos y correcciones descritos anteriormente y comparando con la sección eficaz del nivel 5'S del Helio se obtienen las secciones eficaces de excitación en el máximo como se muestra en la Tabla VII. Se presentan además los resultados de otros autores.

A partir de la ecuación (I.9), junto con la (I.30) puede deducirse la sección eficaz de excitación del nivel vibracional del estado electrónico, ya que

$$\sigma_{v'v''} = B_{v'v''} \sigma_{v'}$$

Se ha calculado de este modo la sección eficaz de excitación máxima del estado $B^2\Sigma_u^+$ para $v' = 0,1$ y comparado con los resultados de otros autores, como se muestra en la Tabla VII.

Por otra parte se sabe que la suma de la sección eficaz

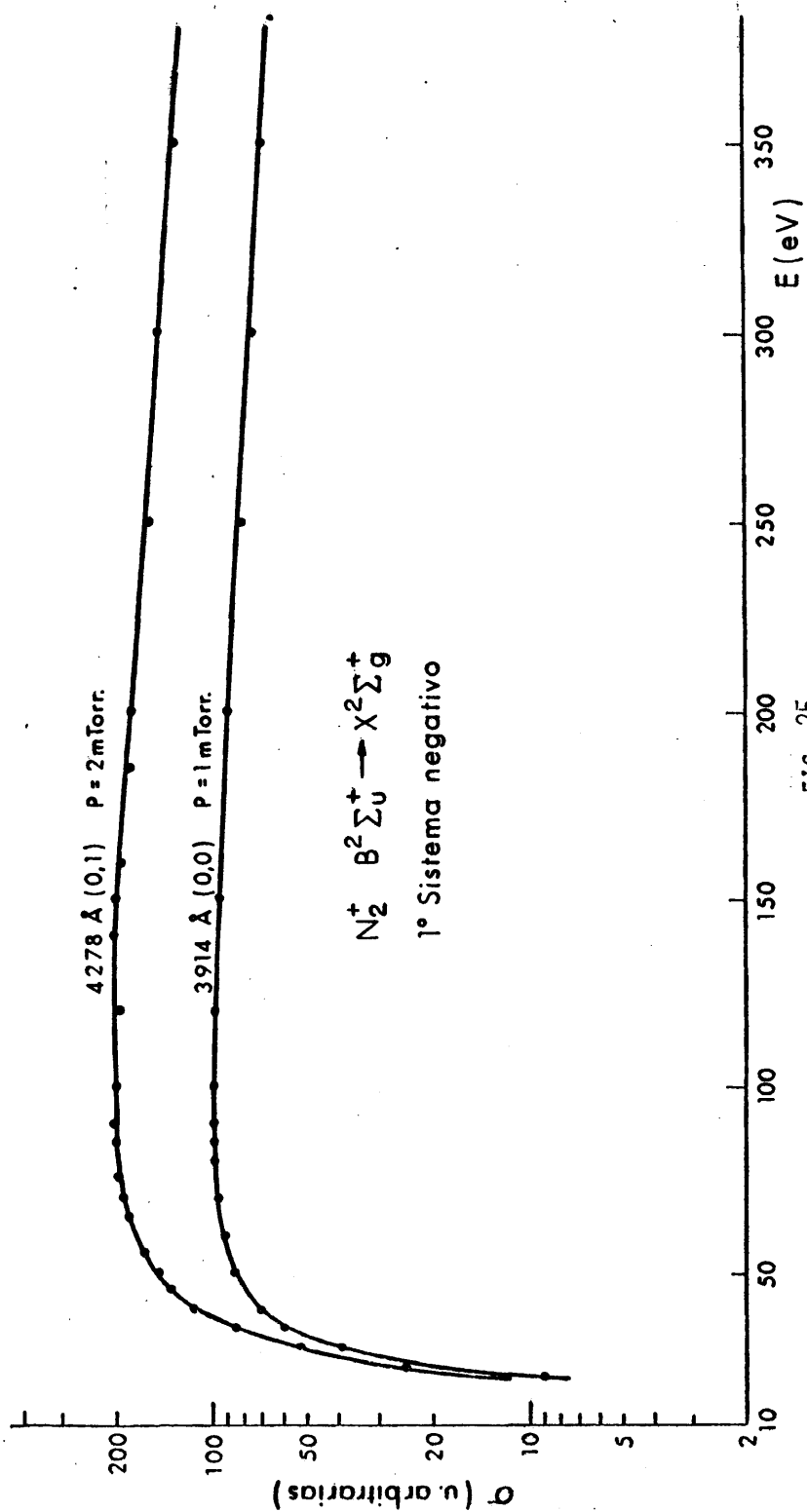


FIG. 25

FUNCION DE EXCITACION

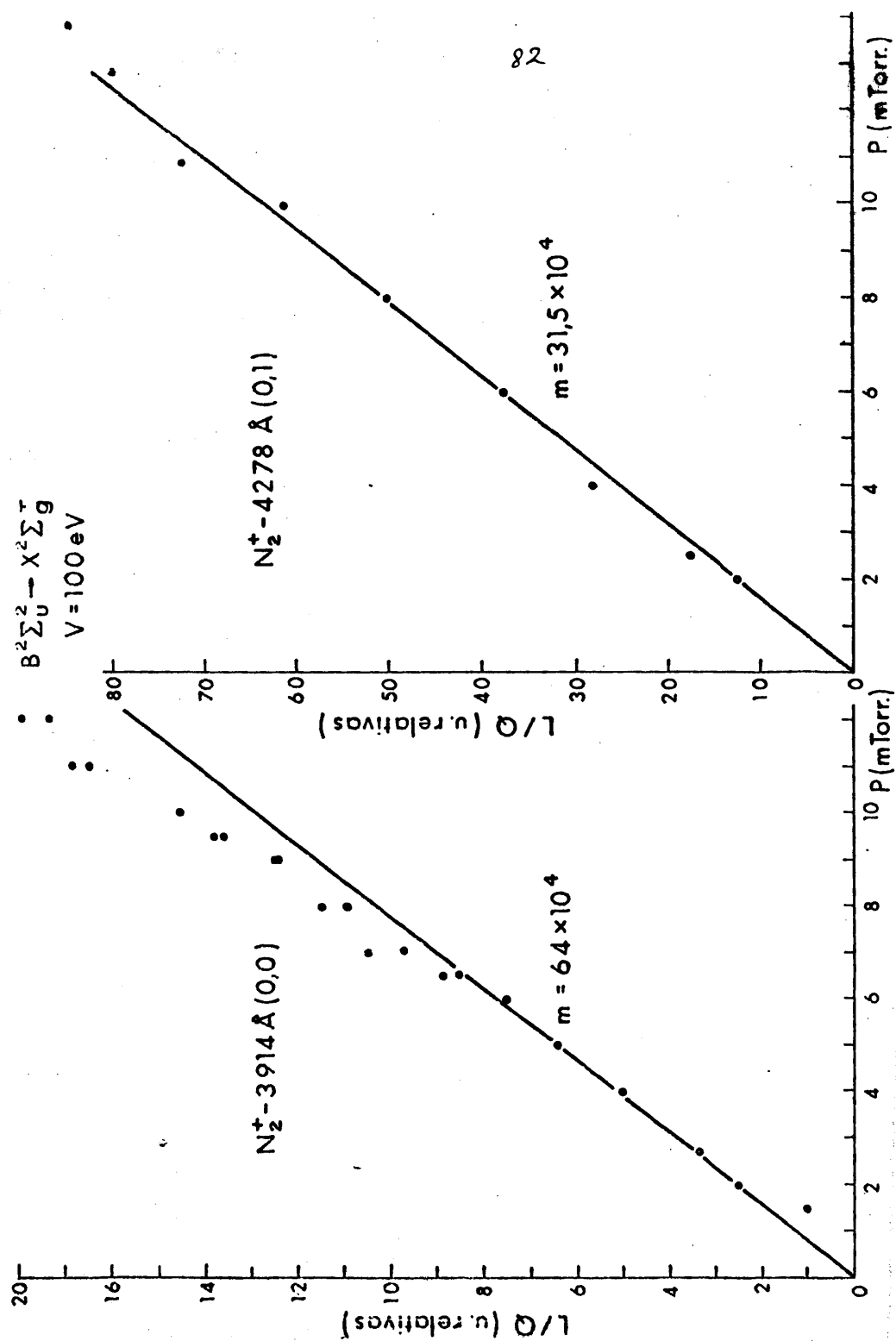


TABLA VII

Sección eficaz de excitación en el máximo de las bandas del Primer Sistema Negativo Transición $B^2\Sigma_u^+ + X^2\Sigma_g^+$. ($\times 10^{-18}$ cm²) .

$v'-v''$	$\lambda(\text{\AA})$	(32)	(30)*	(37)	(38)	(39)	Este trabajo
0-0	3.914	14.7	15.6	16.8	6.2	17.4	15.4
0-1	4.278	4.7	5.4	5.71	2.5	-	5.35
0-2	4.709	1.1	1.1	1.07	0.7	-	0.82
1-1	3.889	-	0.61	-	-	-	0.65
1-2	4.236	-	0.69	-	-	-	0.78
1-3	4.651	-	0.27	-	-	-	0.22
Error Experimental.		15%	18%	15%	10%	15%	15%

*Estas medidas fueron realizadas a 120 eV . Las demás a 100 eV .

Sección eficaz de excitación máxima de niveles vibracionales del estado $B^2\Sigma_u^+$ ($\times 10^{-18}$ cm²) para 100 eV .

v'	0	1
(30)	22.3	2.6
(36)	20.5	1.7
(38)	9.45	-
(37)	23.8	-
Este trabajo	21.6	2.8

de excitación de la banda asociada a las transiciones desde un nivel vibracional dado v' a todos los niveles vibracionales más bajos v'' conduce a la sección eficaz de excitación de ese nivel vibracional. La suma de la sección eficaz de excitación de todos los niveles vibracionales proporciona la sección eficaz de excitación del estado electrónico de la molécula.

II.2.3.- *Discusión*

Del estudio de la Tabla V de intensidades relativas del Primer Sistema Negativo, se observa que la mayoría de los autores han medido solamente las tres primeras bandas quizá por ser las otras más débiles y de más difícil medida. De todas formas se presentan casi todas con muy buen acuerdo salvo las realizadas por Stewart y Gabathuler que dan valores muy altos. Los valores teóricos están también en general de acuerdo con los experimentales.

Las razones de ramificación teóricas y experimentales de la Tabla VI realizadas en este trabajo presentan ligeras discrepancias, que no llegan al 10% en el peor de los casos.

En las secciones eficaces de excitación que se comparan en la Tabla VII se observa que las medidas de Stewart proporcionan valores muy bajos en relación con el resto, lo contrario que en las medidas de intensidades relativas. Estos resultados no son muy significativos actualmente dada la evolución y mejora de los métodos experimentales en los últimos años y habiendo transcurrido veinticinco años desde su publicación. La única medida presentada por Borst y Zipf correspondiente a la banda (0.0) es el valor más alto de todos los autores, aunque su desviación no es muy significativa. La mayoría de los autores sólo presentan los valores de las secciones eficaces de las tres primeras bandas y nuestros resultados solamente pueden compararse en su totalidad con las medidas de Stanton y St. John, con los cuales el acuerdo de los resultados es bueno.

El error experimental total cometido en estas medidas es de un 15% .

Los presentes resultados obtenidos nos confirman que el método de medida de secciones eficaces de excitación por impacto de electrones que se ha utilizado en este trabajo es bueno.

Todos los resultados de nuestras medidas, dentro de un margen de error tolerado en este tipo de experiencias, están en completo acuerdo con los de otros autores que han utilizado también el método óptico para la medida de secciones eficaces de excitación.

El éxito de las medidas en N_2 y N_2^+ nos permite abordar la realización de medidas de secciones eficaces en otros gases en donde la comparación con otros resultados va a ser difícil.

CAPITULO III

RESULTADOS OBTENIDOS PARA EL ATOMO DEL HELIO

III.1.- MEDIDA DE SECCIONES EFICACES EN HELIO

El Helio debido a su sencillez de estructura atómica, ha sido siempre el elemento más utilizado para realizar experiencias de medida de las secciones eficaces de excitación por impacto de electrones de sus niveles. Por otra parte, salvo el hidrógeno, también es el más sencillo para su determinación teórica y por ello se han aplicado sobre el Helio muchos investigadores utilizando aproximaciones cada vez más elaboradas, con objeto de obtener resultados que concuerden lo más exactamente posible con los valores reales.

Para bajas y medias energías de los electrones se usaron unos tipos de aproximación y para energías altas otras aproximaciones distintas. No hay por tanto un rango único de energías para la cual una aproximación determinada tenga validez. Por todo ello los resultados experimentales cobran una singular importancia puesto que sirven de guía y marcan las cotas que permiten juzgar sobre la bondad de las aproximaciones introducidas en los cálculos teóricos.

A pesar del número de autores que han obtenido experimentalmente las secciones eficaces de excitación de los niveles del Helio, hay sin embargo muchas discrepancias entre ellos. Quizá por el hecho de que intervienen procesos secundarios a veces difíciles de determinar y también por la dificultad que supone la

calibración exacta del sistema óptico.

En el presente trabajo se han calculado las secciones eficaces de excitación de algunos niveles del He, especialmente significativos, singletes y tripletes y se han analizado algunos problemas que se presentan en el proceso de excitación.

Similármemente a como se detalló en el capítulo I y como se midieron las secciones eficaces de la molécula de nitrógeno, se procedió a la medida de las secciones eficaces del Helio, utilizando la sección eficaz del nivel $5'S$ como patrón.

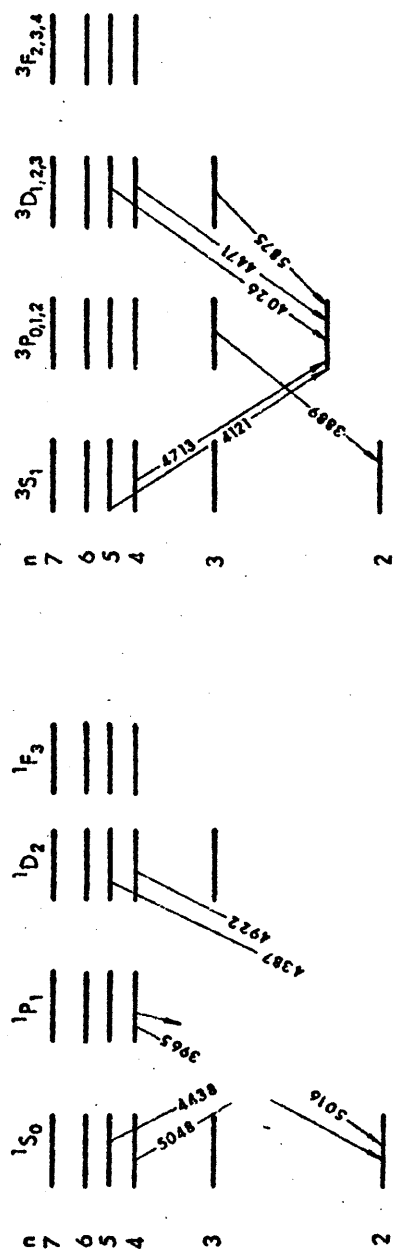
En la Fig. (27) se muestra un diagrama de los niveles de energía del He y en la (27.a) un espectro de las líneas medidas.

III.2.- CARACTERÍSTICAS DE LA LINEA $5'S$ UTILIZADA COMO PATRÓN.

La transición $5'S - 2'P$ (4.437 \AA) fue medida en idénticas condiciones de presión, energía, amplificación, etc. que las demás transiciones estudiadas.

Se trazó la función de excitación a la presión de 5 mtorr. Dicha función se muestra en la Fig. (23) para energías de los electrones desde el umbral hasta 400 eV. Presenta un máximo hacia los 40 eV con una pendiente decreciente suave para energías superiores a las del máximo, aunque más pronunciada que en el caso de la molécula ionizada del nitrógeno.

Para poder corregir las demás líneas por el perfil instrumental, se midió el área de la línea con la multiescala. Más tarde se verá que todas las líneas del He medidas aquí tienen la misma forma, con una relación área/intensidad máxima igual para todas, con lo que esta corrección se hace innecesaria tal como era de esperar.



Estados singletes

Estados tripletes

DIAGRAMA DE GROTIAN DEL He.

FIG. 27

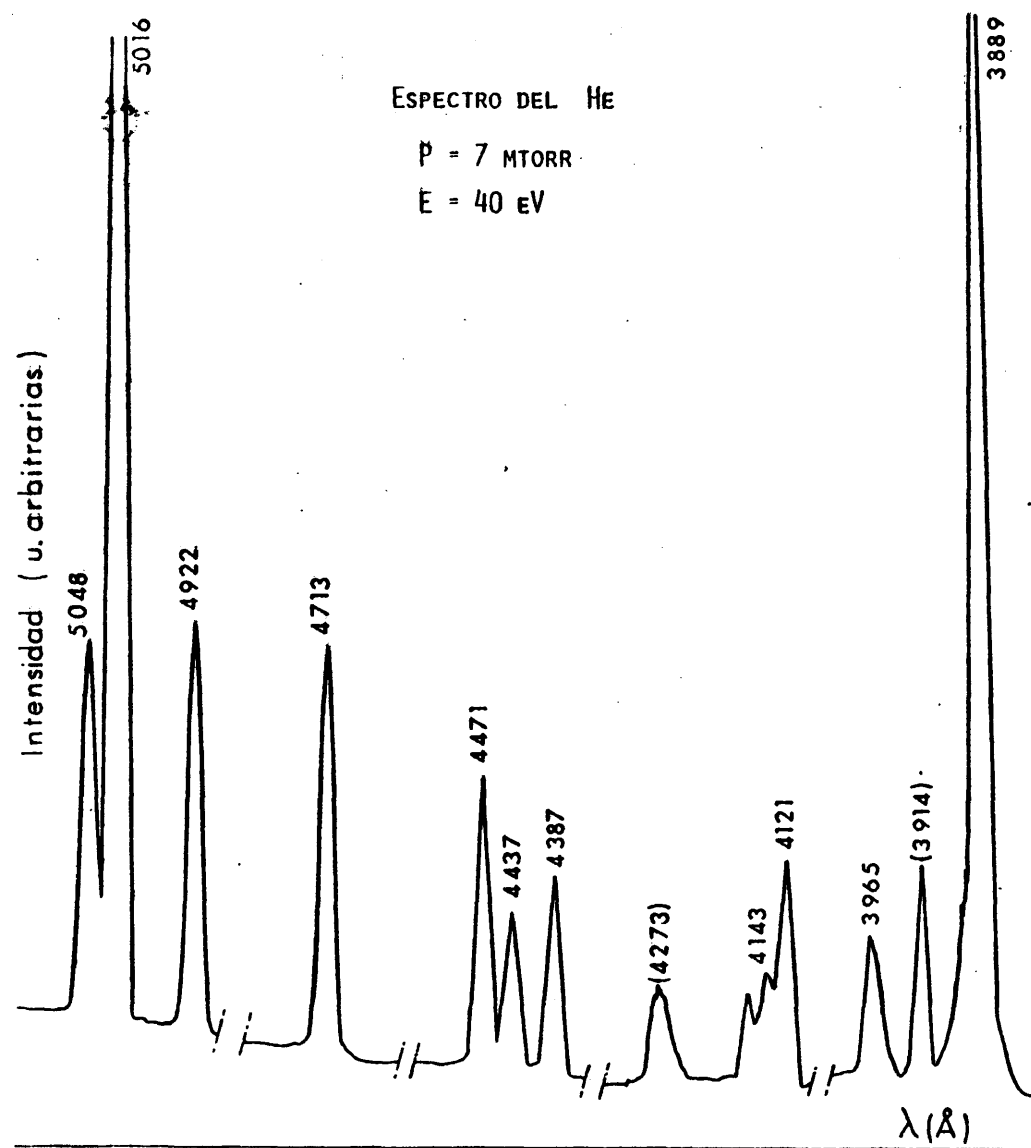


FIG. 27.A

El espectro obtenido se mostró en la Fig. (22). Se midió la intensidad luminosa en la función de la presión observándose que los puntos se ajustaban a una recta, tal como ya fue mostrado en la Fig. (21).

Esta línea no está conectada ópticamente con el fundamental por lo que el efecto de atrape radiativo no existe. Aunque se pensaba que no era probable que existieran cascadas desde otros niveles superiores, se trazó la curva de desexcitación para comprobar que efectivamente así ocurría. La Fig. (13) presentada anteriormente, muestra la curva de desexcitación del nivel 5'S en donde se encontró una pequeña componente de cascada (40) cuya contribución es del orden del 5% de la intensidad total.

Recordemos de la definición (I.9) de sección eficaz de excitación desde el nivel fundamental al nivel i σ_i , es igual a

$$\sigma_i = \frac{\sum A_{ij}}{A_{ij}} \sigma_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{\beta_{ij}}$$

siendo β_{ij} la razón de ramificación de la transición $i \rightarrow j$ y σ_{ij} la sección eficaz de la transición del nivel i al j , llamada también sección eficaz parcial.

Tal como se explicó anteriormente el valor calculado de $\beta(5'S - 2'P) = 0.47$, el de $\sigma(5'S) = 3.2 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ a 200 eV (D.W.P.O.) y por tanto

$$\sigma(5'S - 2'P) = 1.5 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ a } 200 \text{ eV}$$

En las medidas realizadas se calcularon las secciones eficaces parciales de las líneas en estudio, comparándolas con la sección eficaz parcial de la línea 4.437 \AA del He. Calculando las razones de ramificación de los niveles correspondientes a partir de las probabilidades de transición dadas por Heddle (11), se obtendrán los valores de las secciones eficaces de los niveles que se han estudiado.

III.3.- MEDIDA DE LA SECCION EFICAZ DEL ESTADO 4'S .

Para medir la sección eficaz del nivel 4'S utilizamos la transición 4'S - 2'P de 5.048 Å de longitud de onda.

La función de excitación se trazó a 5 mtorr de presión desde el umbral hasta 400 eV . Al igual que la transición 5'S - 2'P (4.437 Å) estudiada, caen las dos al mismo nivel 2'P . Como son de la misma serie, poseen las dos la misma forma en la función de excitación, como puede verse en la Fig. (23). Las correspondientes gráficas $\log I - \log E$ dan en ambos casos como resultado, en el intervalo de 100 a 400 eV , una recta de pendientes (-0.65) y (-0.62) Fig. (28). Lo cual corresponde a una variación de la sección eficaz como $E^{-0.65}$ y $E^{-0.62}$ respectivamente. A mayores energías correspondería mayores valores de la pendiente.

La obtención de la relación de la intensidad luminosa en función de la presión se realizó a 100 eV y el resultado puede verse en la Fig. (21) donde los puntos experimentales se ajustan, en ambos casos, a una recta que pasa por el origen.

Realizadas las medidas, resulta una sección eficaz parcial para la línea de 5.048 Å de

$$\sigma(4'S - 2'P) = 8.02 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ a } 100 \text{ eV}$$

Aplicando el valor de la función de excitación en el máximo, nos da la sección eficaz parcial máxima:

$$\sigma(4'S - 2'P) \text{ máxima} = 12.35 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$$

La razón de ramificación del nivel 4'S tiene un valor (11) de $\beta_{ij} = 0.59$ por lo que resulta la sección eficaz de excitación del nivel 4'S .

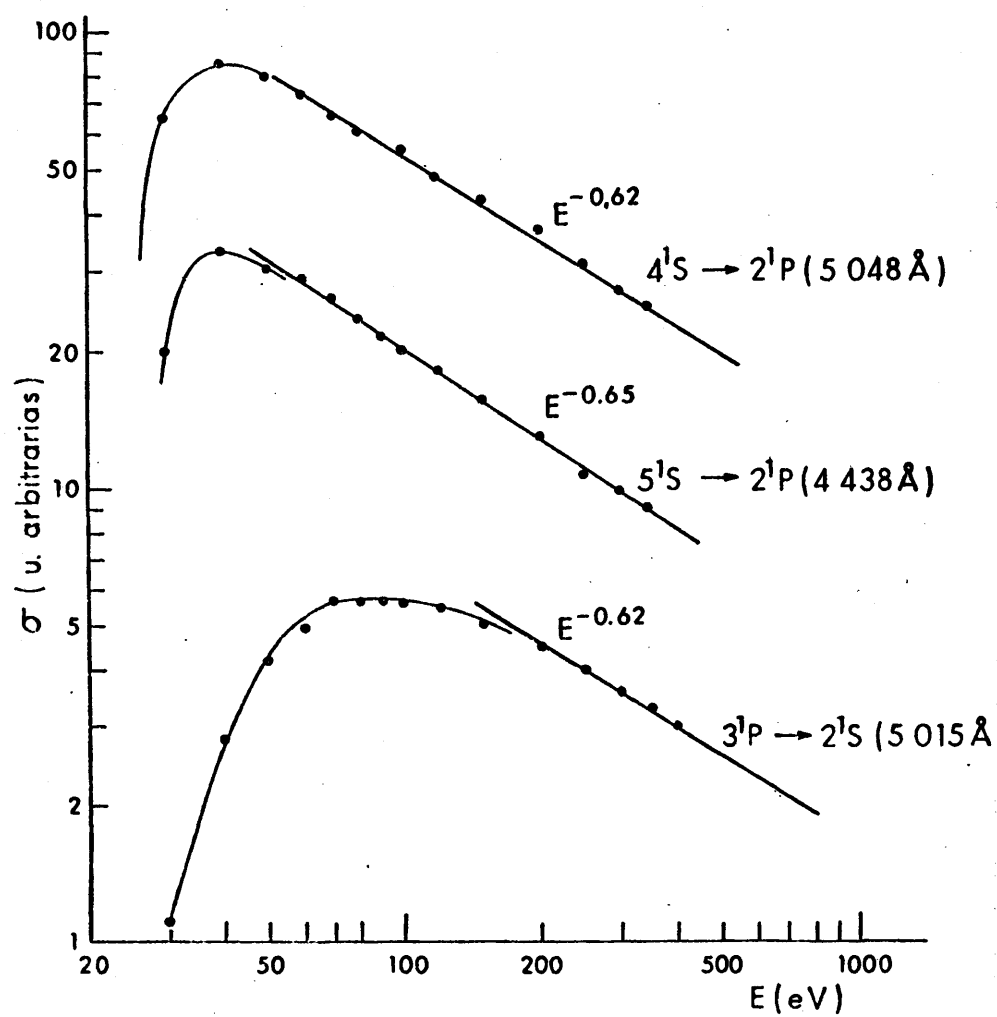


FIG. 23

FUNCIÓN DE EXCITACIÓN (LONG λ - LOG E), SINGLETES He ,

$$\sigma_{4'S} = 13.6 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ a } 100 \text{ eV}$$

$$\sigma_{4'S} = 20.9 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ en el máximo}$$

III.3.1.- Función de excitación del nivel 3'P

La función de excitación de este nivel resonante se muestra en la Fig. (23). Se puede observar que la forma de la curva es distinta de las encontradas anteriormente del He. Posee un máximo ancho correspondiente a una energía de 100 eV y su pendiente en el gráfico doble logarítmico de la Fig. (28) entre 200 y 400 eV es de 0.62.

De esta transición no se ha medido la sección eficaz porque el nivel 3'P está sujeto a autoabsorción resonante y a desexcitación por colisiones con átomos de He en estado neutro. A pesar de la gran intensidad de esta línea, no consideramos este nivel apropiado para comparar los resultados teóricos y experimentales.

Se ha presentado aquí esta función de excitación para mostrar las características comunes de la variación de la sección eficaz con la energía para todas las transiciones ópticamente permitidas.

III.4.- MEDIDA DE SECCIONES EFICACES DE ESTADOS TRIPLETES.

III.4.1.- Estado 4^3S .

III.4.1.1.- Función de excitación

Para medir la sección eficaz del nivel 4^3S se tomó la transición $4^3S - 2^3P$ correspondiente a 4.713 Å .

Se trazó la función de excitación para diferentes presiones desde el umbral hasta 400 eV. Como puede verse en la Fig. (29), dicha función presenta un máximo para 35 eV con una pendiente de bajada rápida al principio y más lenta a partir de 150 eV. En la Fig. (30) se muestran las mismas curvas de la función de excitación en escala $\log I - \log E$. La pendiente que presentan desde el máximo hasta 100 eV es de (-1.9 ± 0.1) y el último tramo de curva tiene una pendiente de (-0.7) .

En principio según la aproximación para los valores teóricos de Ochkur (14) debería poseer una pendiente de (-3) aunque en los valores experimentales se ha observado una pendiente más suave (~ -2) .

En los trabajos realizados por Showalter y Kay (13) y (41) no se observó nada más que una única pendiente del orden de (-3) , pero en otros muchos trabajos, como los de St. John, McConkey y otros (12), (43), (44) se observa junto con una pendiente rápida, otra componente lenta para más altas energías, de la misma forma que la obtenida en nuestro trabajo. Si realmente existiera la componente lenta en la función de excitación del estado triplete 4^3S , equivaldría a suponer que existe una excitación adicional que procedería de la población de ese nivel por otros niveles superiores, es decir, procedente de cascadas. En esta línea es posible que se midiera algo de luz procedente de la 4.709 \AA (0.2) del Primer Sistema Negativo del N_2^+ ; cuya sección eficaz es alta todavía a 100 eV y que puede ser la causa de la pendiente tan lenta que se observa en la Fig. (29.b), además de la cascada.

III.4.1.2.- Corrección por cascadas

Para conocer la amplitud de la componente de cascada que es necesario descontar a la sección eficaz aparente, se procedió como se indicó en 1.2.5, trazando las curvas de desexcitación del nivel. Estas medidas se realizaron a una presión de 10 mtorr y

He - $4^3S - 2^3P$
(4713 Å)

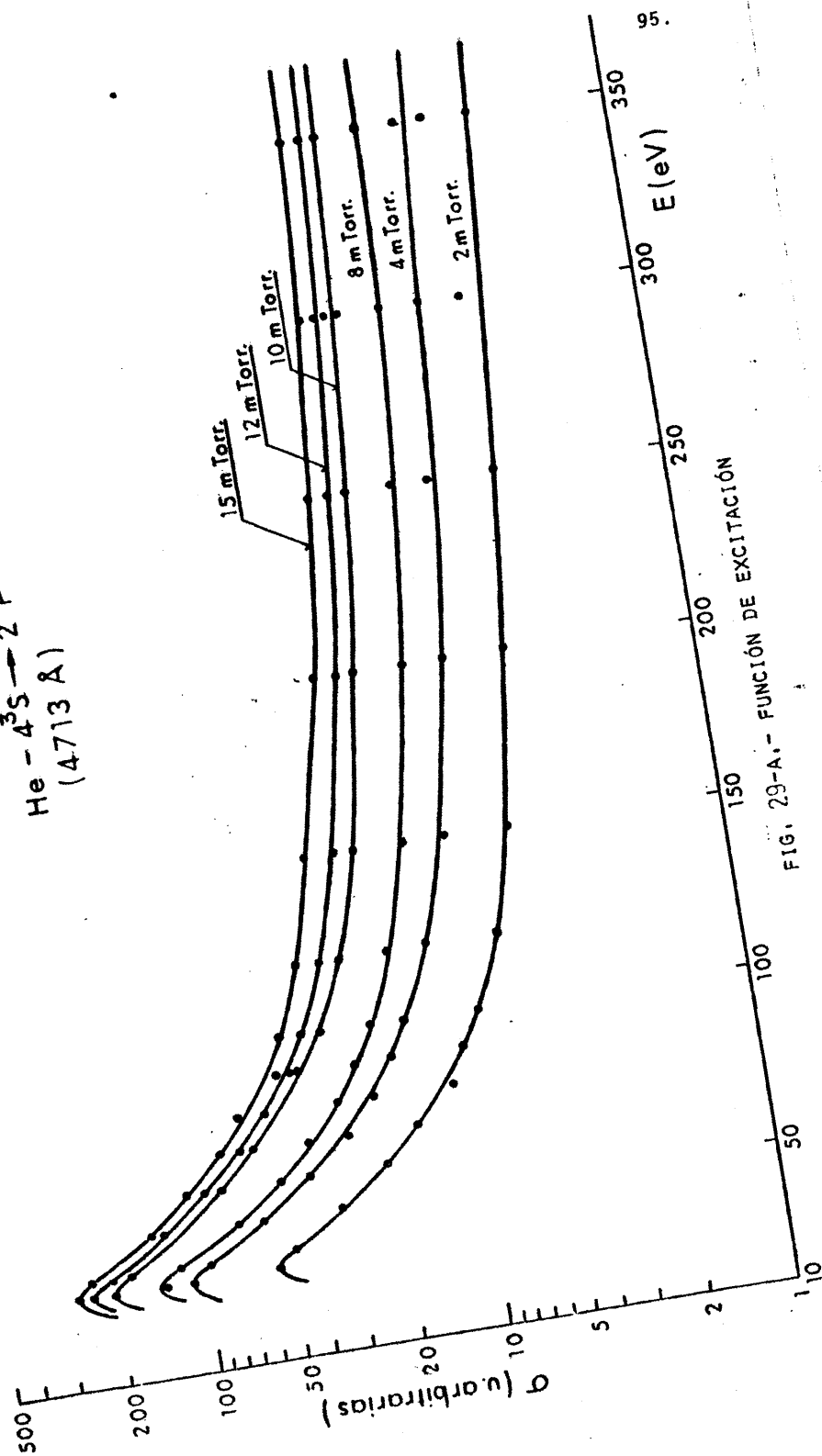


FIG. 29-A.- FUNCIÓN DE EXCITACIÓN

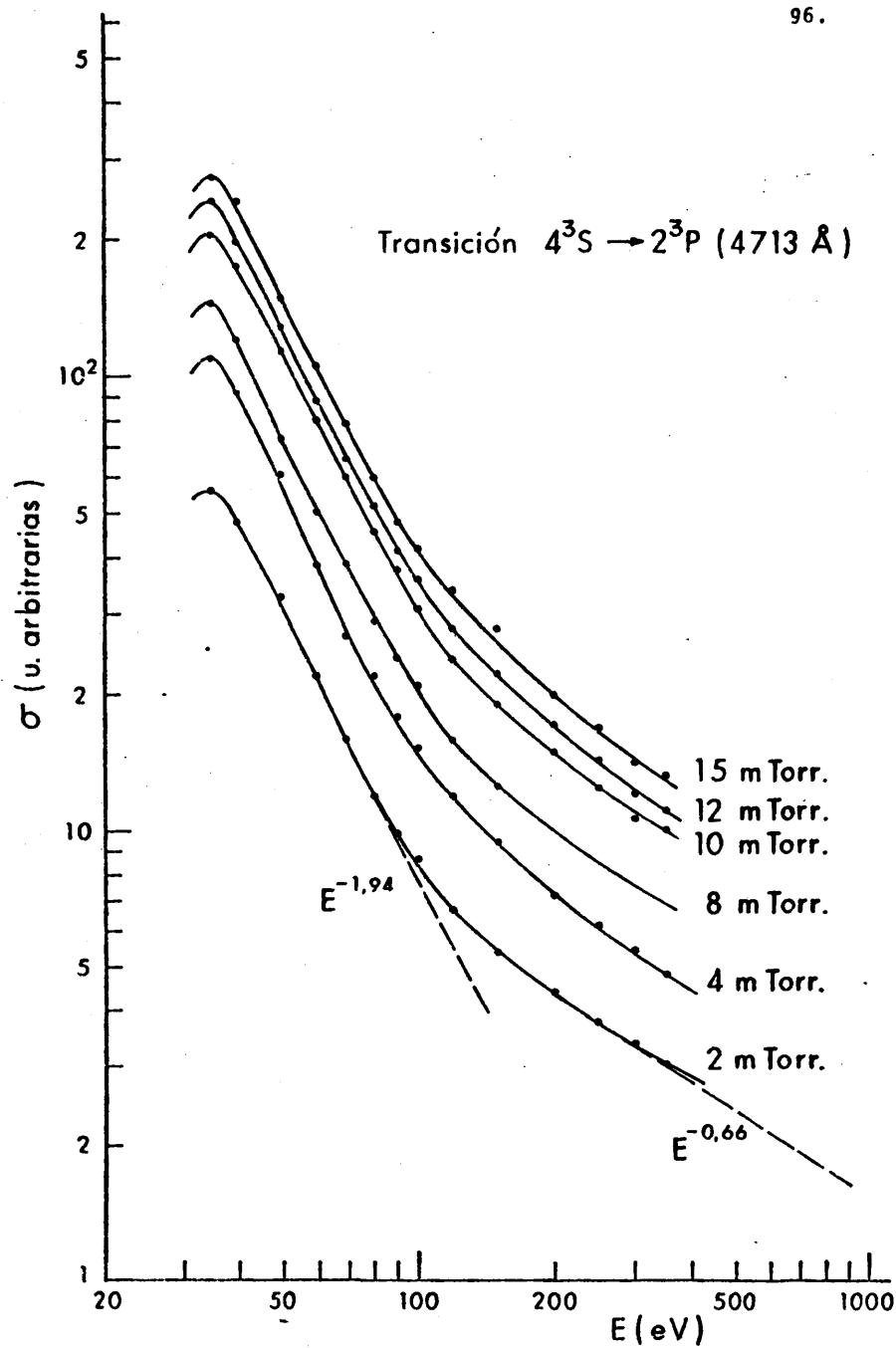


FIG. 29-B

FUNCIÓN DE EXCITACIÓN (LOG I-LOG E)

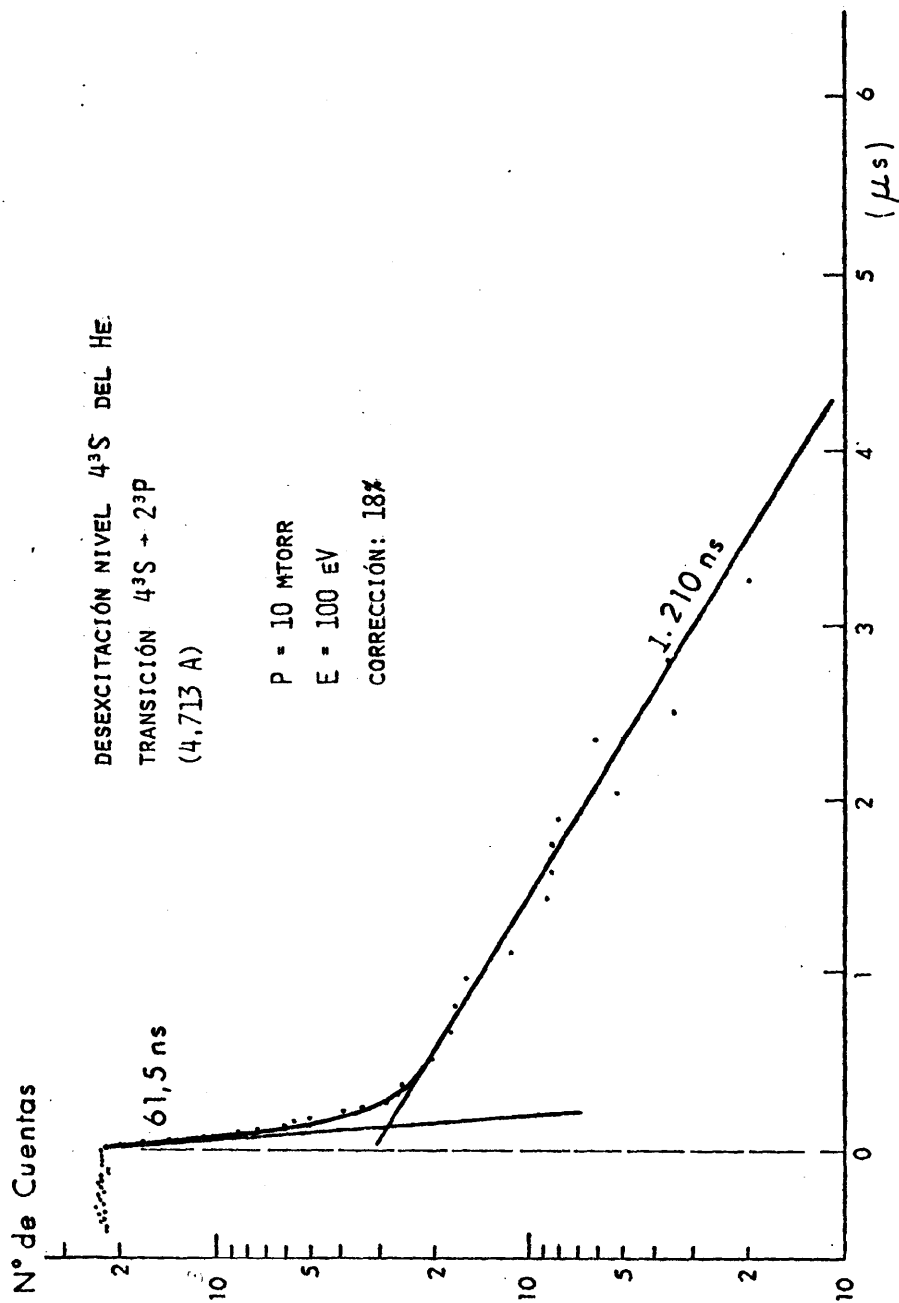


Fig. 30

100 eV de energía, con un impulso de excitación de 1600 ps de anchura.

El nivel 4^3S tiene una vida media del orden de 61 ns . Al obtener la curva de desexcitación se utilizó un convertidor tiempo-amplitud de margen amplio (15 μ s) , para observar si existían componentes de cascada de vida media larga. En la Fig. (30) se muestra la curva obtenida para esta transición del He. Se observa una componente de 1.210 ns . Aplicando la ec. (1.27) se puede conocer el factor de corrección, que debe aplicarse a la función de excitación aparente para obtener el valor real. Dicha corrección en este caso es de un 18% .

Conocido el factor de corrección correspondiente a la cascada para una energía dada (100 eV) , debe descontarse este factor del valor correspondiente de la función de excitación, para esa misma energía.

En la Fig. (31) se muestra la pendiente de la intensidad luminosa en función de la presión a 100 eV para la línea de 4.713 Å sin corregir y también corregida en un 20% para tener en cuenta la influencia máxima de la impureza de N_2 presente. En ambos casos los puntos se ajustan a una recta que pasa por el origen. Este valor corregido es el que se tomará como valor definitivo de la pendiente m para determinar la sección eficaz parcial de la línea.

Aplicadas todas las correcciones necesarias, de las que se ha hablado en el cap. I, resulta un valor de la sección eficaz parcial de la línea 4.713 Å del triplete 4^3S de

$$\sigma(4^3S - 2^3P) = 1.6 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ (a 100 eV)}$$

Utilizando la función de excitación hallada previamente, se obtiene la sección eficaz parcial máxima que es de

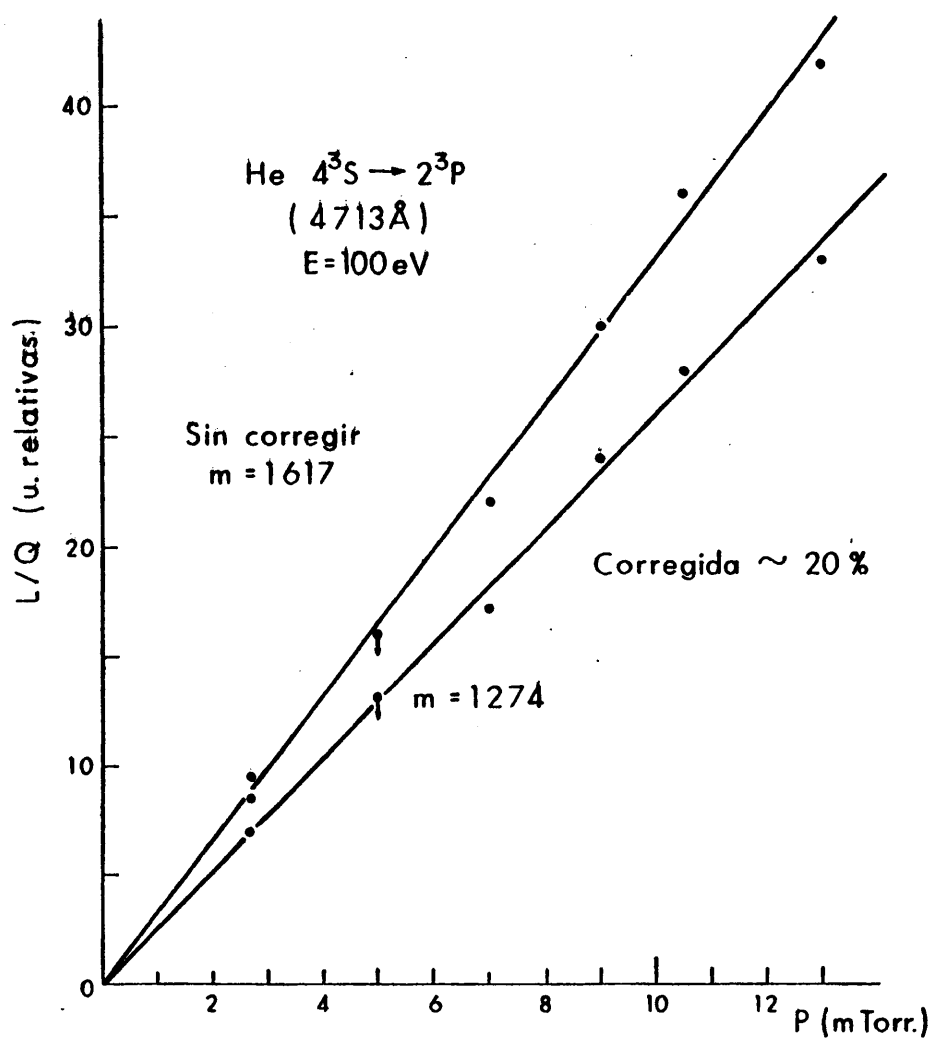


FIG. 31

RELACIÓN INTENSIDAD-PRESIÓN

100.

$$\sigma(4^3S - 2^3P)_{\text{máxima}} = 14.6 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$$

La razón de ramificación del nivel 4^3S tiene un valor de

$$\beta_{ij} = 0.59$$

por lo que da como resultado para la sección eficaz de excitación del nivel 4^3S

$$\sigma_{4^3S} = 2.70 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ a } 100 \text{ eV}$$

$$\sigma_{4^3S} = 24.76 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ en el máximo}$$

Todos estos resultados anteriores, corregidos de cascada.

III.4.2.- Estado 3^3P .

El estado 3^3P se ha medido a través de la transición $3^3P - 2^3S$ con longitud de onda 3.889 \AA .

Esta transición está muy cerca de la 3.914 \AA de N_2^+ que es muy intensa y por tanto hay que tener sumo cuidado en medirla independientemente para eliminar toda posible contaminación, por impurezas. Para ello se utilizó la red de ultravioleta en el monocromador pues tiene doble resolución que en la red visible en el cual se han realizado el resto de las medidas.

Fue necesario también efectuar una corrección de la eficiencia de detección de un sistema a otro, para lo cual se tomó una línea del He próxima a la de 3.889 \AA pero que no estuviera influenciada por ninguna del nitrógeno y se midió la diferente respuesta de ambos sistemas. Se tomó la línea de 3.964 \AA y se comparó la emisión de luz de esa transición con las dos redes de difracción del monocromador en las mismas condiciones. La relación de luz entre ellas será la misma que tengan las eficiencias. Resultó necesario aplicarle una corrección de 1.22.

III.4.2.1.- Función de excitación

Se trazó la función de excitación de la línea de 3.889 \AA a diferentes presiones, desde el umbral hasta 400 eV . En la Fig. (32) puede verse la forma de las curvas. Presenta un máximo a los 30 eV con una pendiente rápida hasta los 100 eV y una más lenta hasta los 400 eV . En la Fig. (33) se muestran las mismas funciones de excitación en escala $\log I - \log E$. La pendiente rápida tiene un valor (-2.2) y la lenta vale (-0.64) . En este caso todos los autores coinciden en atribuirle a esta transición una población por cascada causante de esta forma en la pendiente. En la Fig. (34) se muestran los valores de diferentes autores para la sección eficaz aparente en función de la energía de esta transición del He, que aunque no coinciden plenamente en los valores obtenidos, sí lo hacen en la forma en que varía con la energía de los electrones. En la misma figura se presentan los resultados obtenidos por nosotros sin corregir por cascada. Después de aplicarle una corrección de un 30% debida a cascadas, resulta una variación del orden de E^{-3} como se podría prever según los cálculos teóricos.

III.4.2.2.- Corrección por cascada.

Para conocer la proporción de cascada con que contribuye la línea 3.889 \AA se hizo un estudio de la desexcitación del nivel por el método indicado anteriormente. Primero se colocó un convertidor tiempo-amplitud de margen corto para detectar las componentes con vida media no muy largas y se midió la desexcitación a las presiones de $1,5$ y 10 mtorr , para la misma energía de los electrones, de 100 eV . En las Fig. (35), (36) y (37) puede observarse que la amplitud de la componente de cascada va aumentando a medida que aumenta la presión, siendo de 3% a 1 mtorr , de 10% a 5 mtorr y de 17% a 10 mtorr .

Observando la curva de desexcitación de la Fig. (36), por

He $(3^3p \rightarrow 2^3s)$
3889 Å

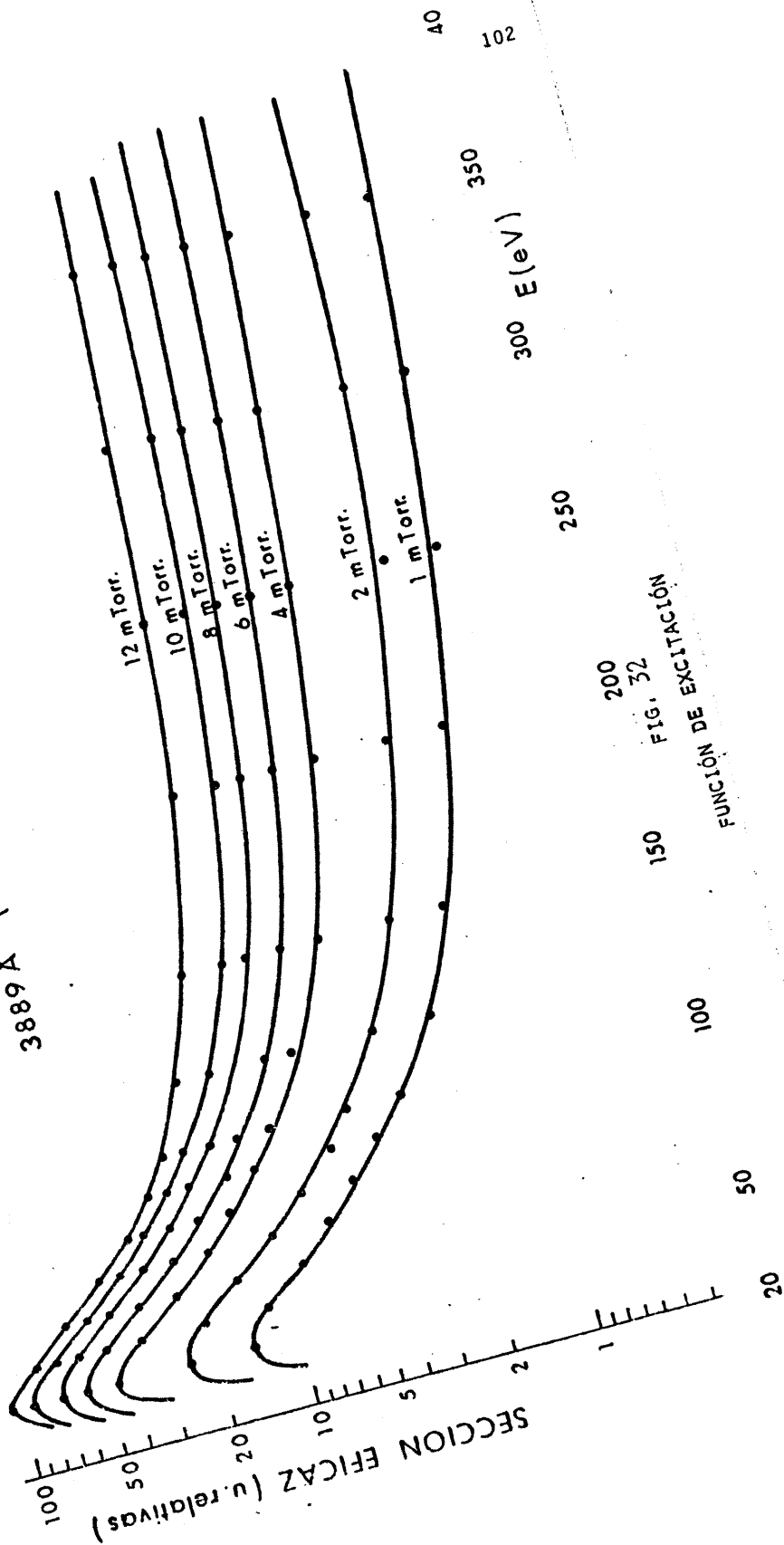


FIG. 52
FUNCIÓN DE EXCITACIÓN

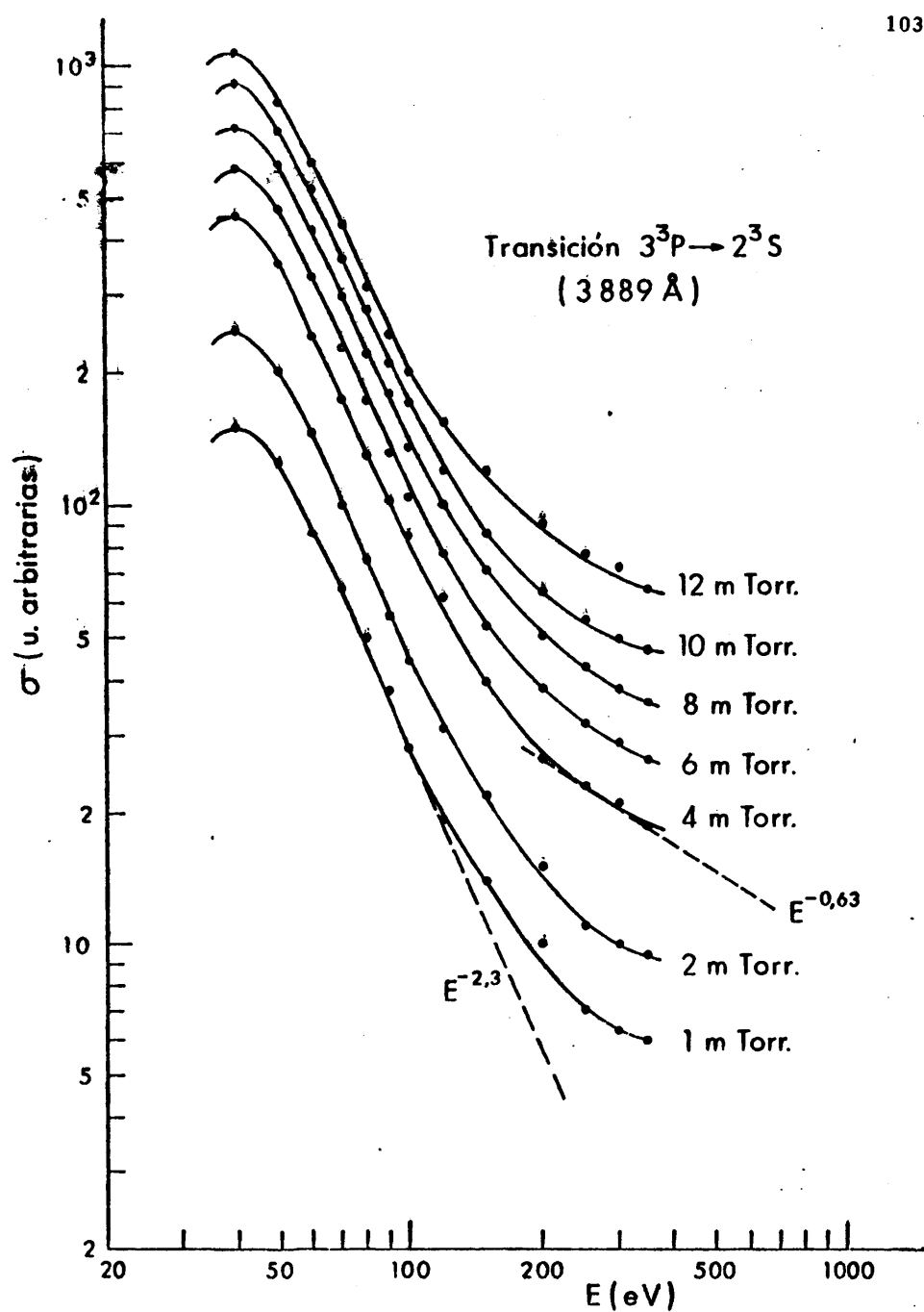


FIG. 33

FUNCIÓN DE EXCITACIÓN (LOG I - LOG E) ,

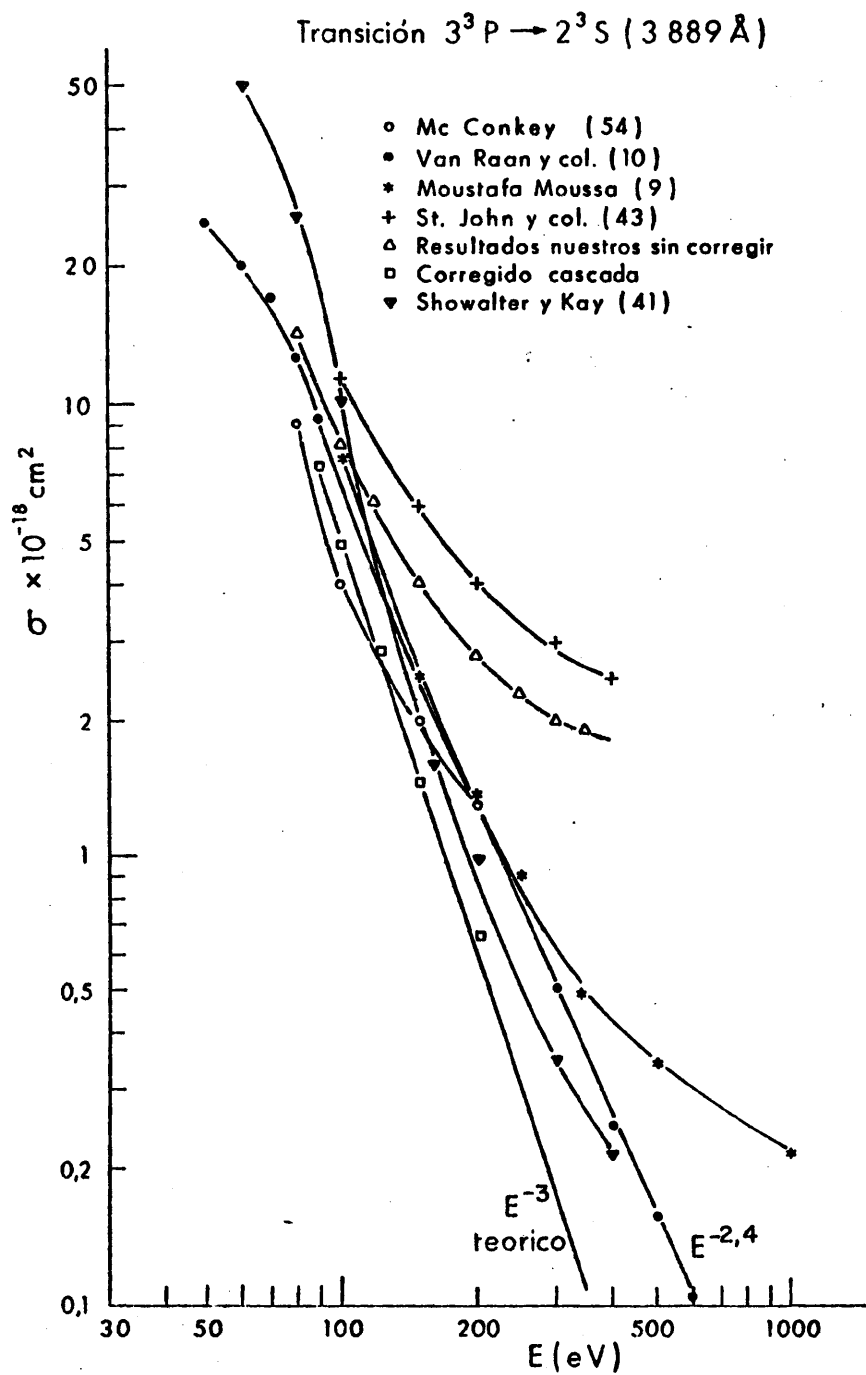


FIG. 34

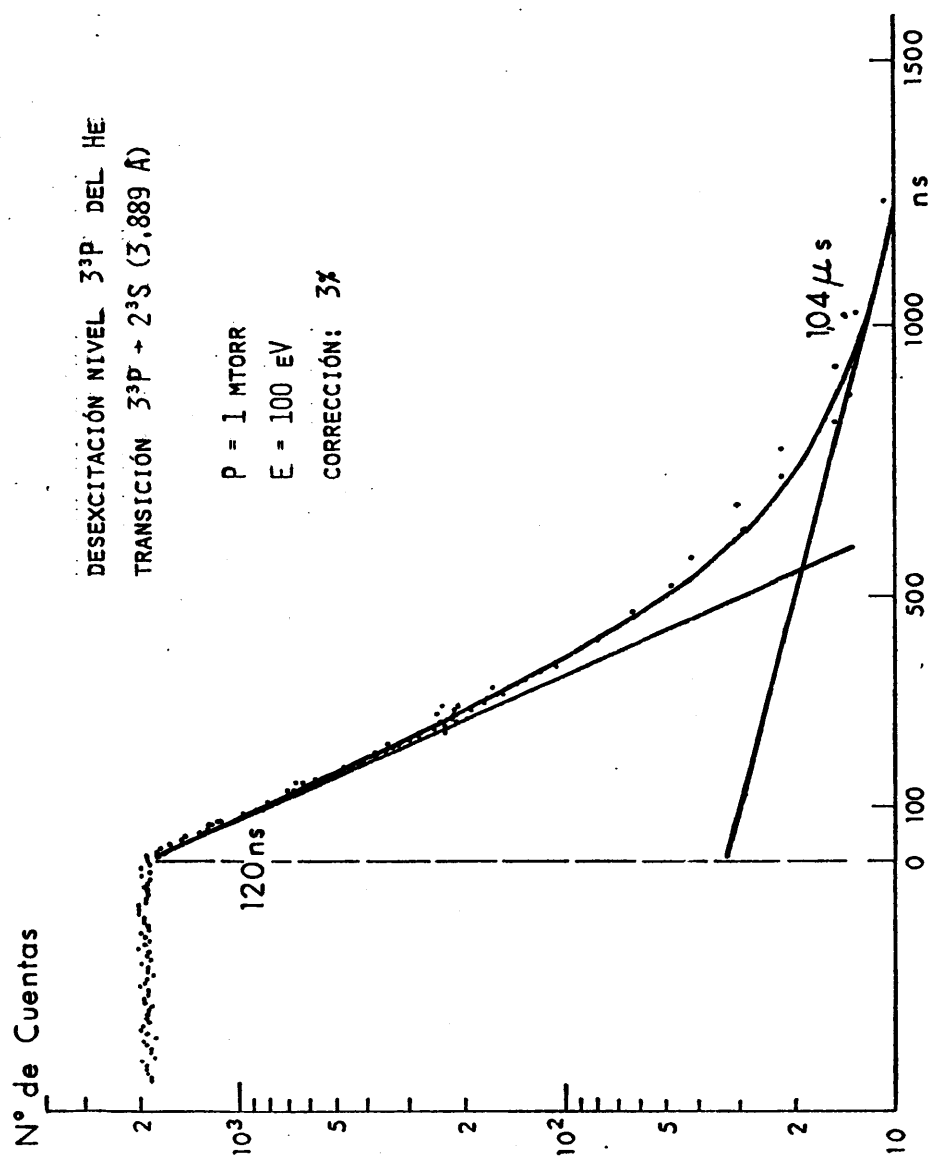


Fig. 35

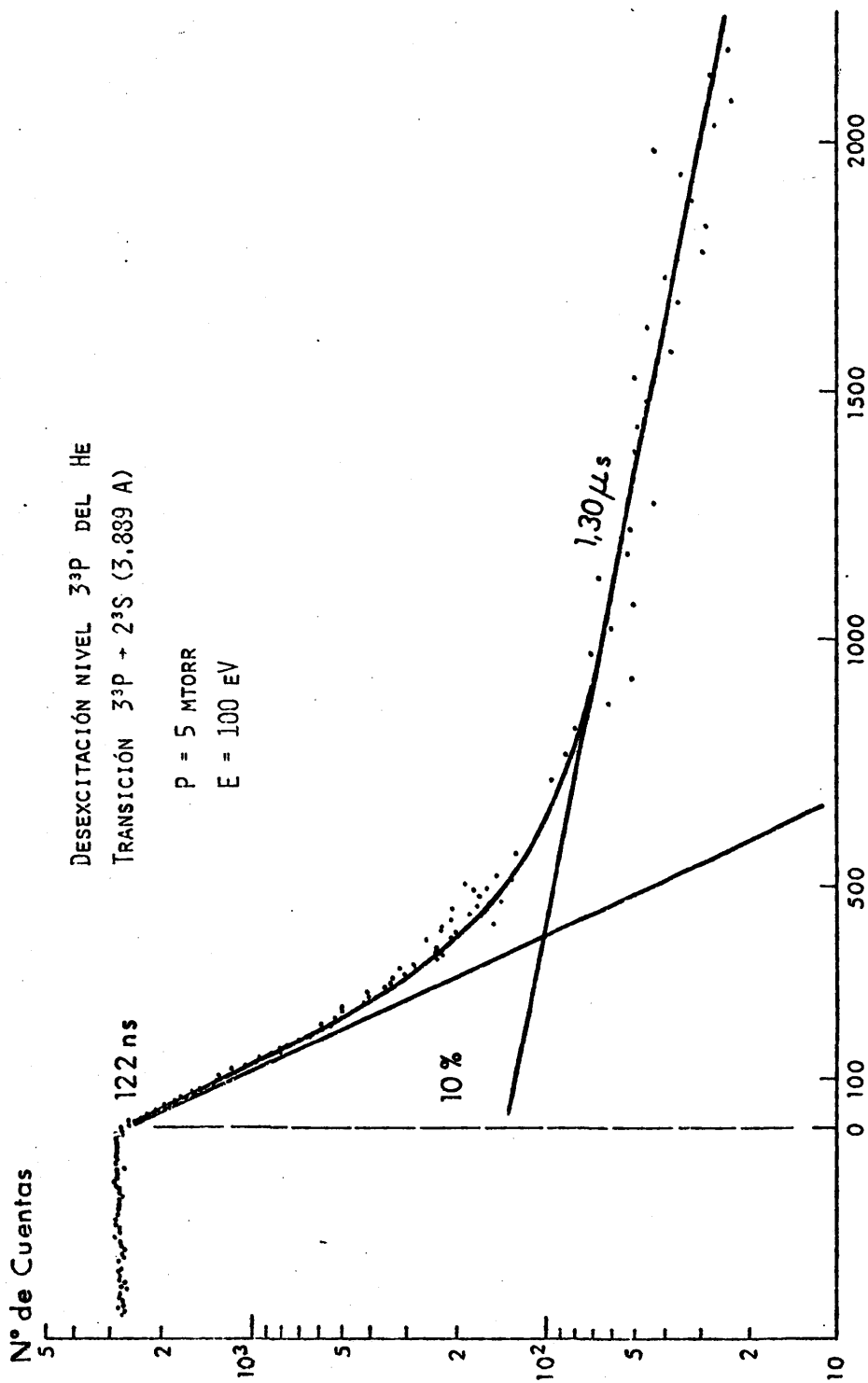


FIG. 36

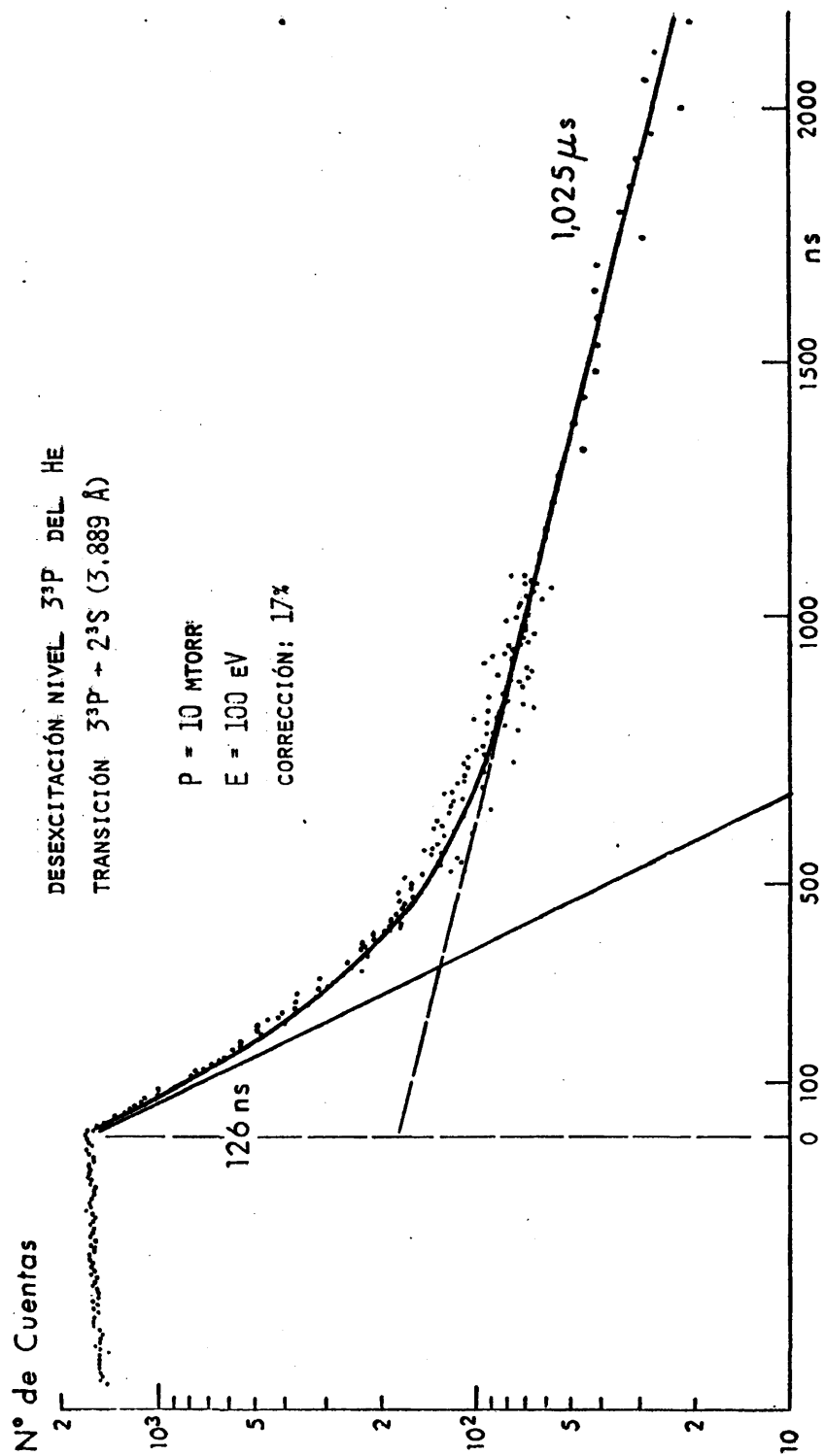


FIG. 37

ejemplo, se ve que la componente resultante de haber restado la componente de cascada, tiene un valor superior a la vida media del nivel 3^3P , que es del orden de 100 ns. Esto hace suponer que no se le ha descontado suficientemente alguna componente. Dicho de otra manera, la componente que es necesario descontar es mayor.

Se hicieron medidas a continuación con un convertidor de margen largo (15 μs) para ver si existían componentes de vida media larga. Se observó que si bien estas existían, eran de poca intensidad y de escasa influencia. Se encontró otra componente además, de unos 200 ns que puede ser interpretada como procedente de niveles n^3D mezclados, que a su vez se ven poblados por cascada de niveles $3F$ y $1F$. Kay y Showalter (41) así como otros autores utilizando distintos procedimientos para determinar el origen de las cascadas, llegaron a la misma conclusión.

En la Fig. (38) se muestra la curva de desexcitación a 100 eV y 5 mtorr, formada por tres componentes, según la cual es necesario aplicar una corrección de 30%. Este factor de corrección se ha aplicado a la curva obtenida de la intensidad luminosa en función de la presión mostrada en la Fig. (39), donde se presentan las rectas antes y después de la corrección. Ambas rectas pasan por el origen y están realizadas las medidas a 100 eV.

Hechas todas las correcciones y aplicando la ecuación de comparación con la línea de 4.438 \AA del He, se han obtenido los valores de la sección eficaz parcial de la línea 3.889 \AA para 100 eV y utilizando la función de excitación, el valor máximo, dando como resultados:

$$\sigma(3^3P - 2^3S) = 11.0 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ a } 100 \text{ eV}$$

$$\sigma(3^3P - 2^3S) = 81.4 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ en el máximo.}$$

DESEXCITACIÓN NIVEL 3^3P DEL HE
TRANSICIÓN $3^3P \rightarrow 2^3S$ (3.889 Å)

P = 5 MTORR

E = 100 eV

CORRECCIÓN : 30%

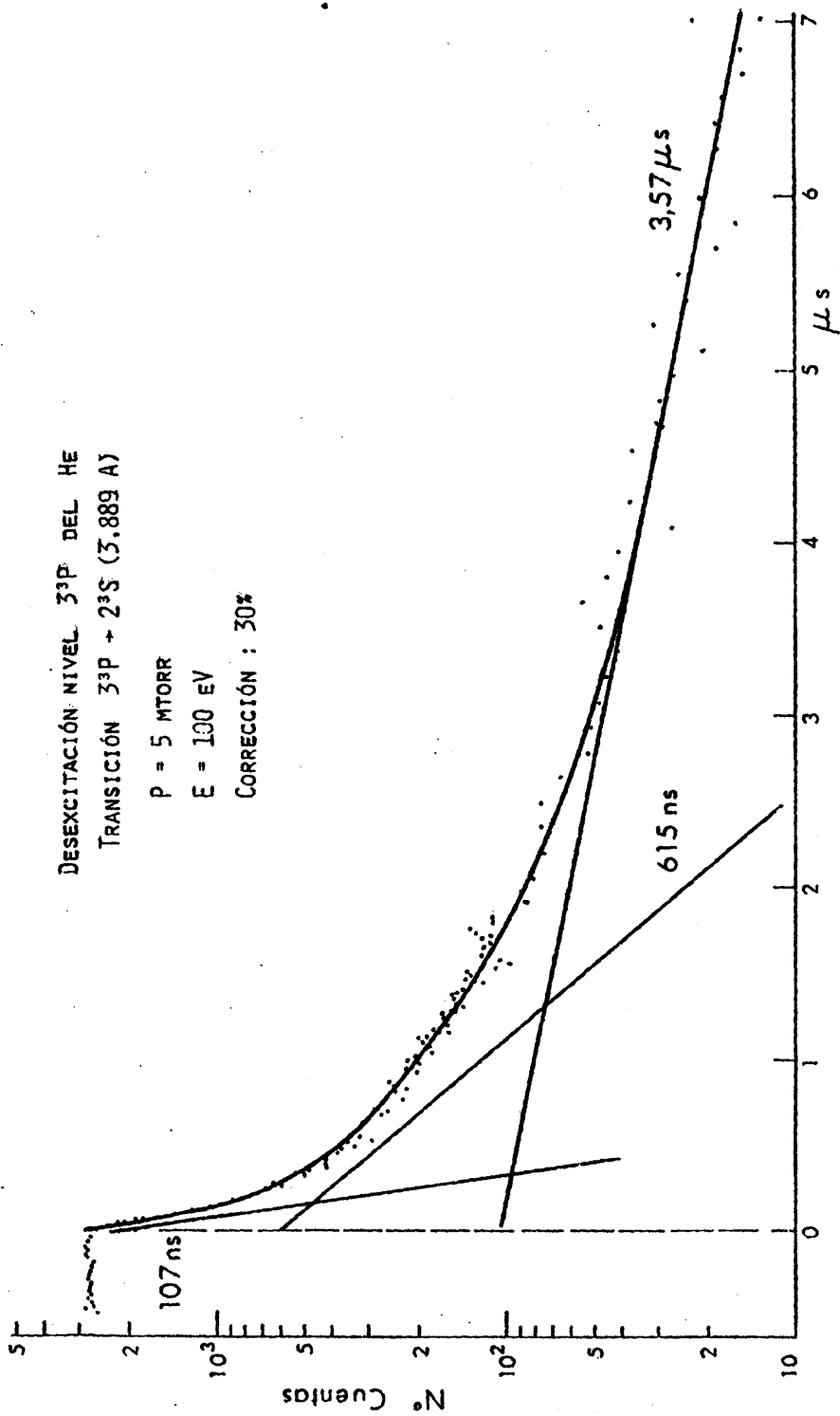


Fig. 38

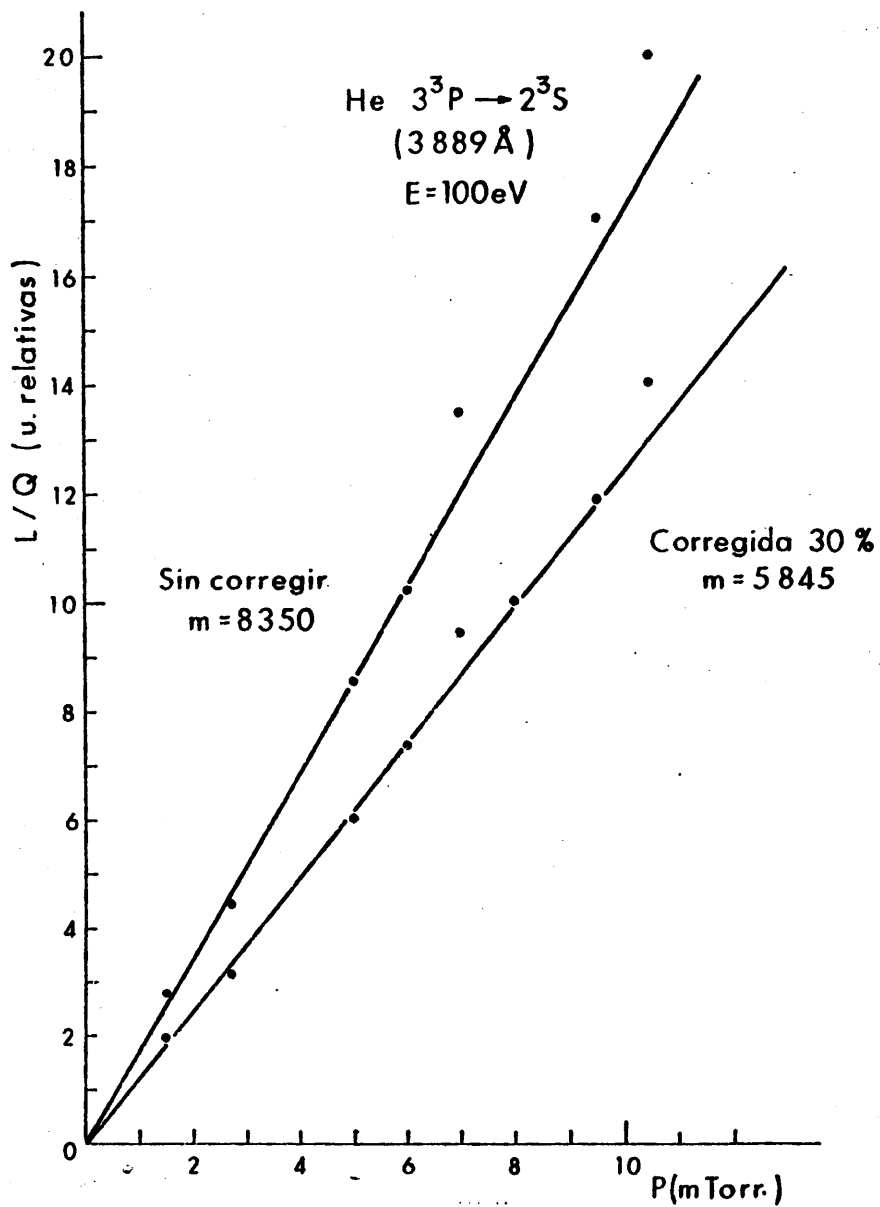


FIG. 39

RELACIÓN INTENSIDAD - PRESIÓN

El nivel 3^3P tiene un factor de ramificación cuyo valor es

$$g_{ij} = 0.89$$

por lo que la sección eficaz de excitación del nivel 3^3P resulta ser

$$\sigma(3^3P) = 12.3 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \quad (\text{a } 100 \text{ eV})$$

$$\sigma(3^3P) = 91.0 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \quad \text{en el máximo}$$

111.5.- DISCUSION

En los niveles estudiados no se observaron efectos de captura radiativa y desexcitación colisional, y las pendientes obtenidas de la intensidad luminosa indican que son independientes de la presión.

En los estados singletes la corrección por cascada es mínima y entra dentro de los errores cometidos en las medidas. En los estados tripletes sí se observó población por cascada que es más acusada en el estado 3^3P que en el 4^3S . La transición $3^3P \rightarrow 2^3S$ (3.889 \AA) fue corregida por un factor de 1.22 correspondiente a la relación de eficiencias entre las dos redes del monocromador.

Para la transición $4^3S - 2^3P$ (4.713 \AA) se obtuvo un factor de corrección del 18% correspondiente a la cascada. Se comprobó que la contribución de la banda de 4.709 \AA del N_2^+ en las medidas de esta transición era del orden del 2%. Por lo cual se le aplicó un descuento total del 20% de manera que quedaran compensados ambos factores correctivos, la contribución de la cascada y la posible contaminación del N_2^+ .

Los resultados obtenidos y comparados con otros autores



se muestran en la Tabla VIII, donde puede verse que existen discrepancias entre unos autores y otros. Se observa que los valores más altos corresponden a medidas de secciones eficaces aparentes, es decir, sin corregir por cascada y polarización de la radiación. En este trabajo no se ha corregido del efecto de la polarización porque como indicamos en el capítulo I, para energías intermedias y altas, la radiación de luz es muy aproximadamente isótropa (10), (36), (55). Algunos autores han realizado una corrección de este tipo para los niveles en estudio, admitiendo que para los niveles $1S$ y $3S$ el factor de corrección es cero y para niveles $3P$ es del 5%, aunque depende sobre todo de la energía de los electrones.

Los valores dados en este trabajo de la sección eficaz de excitación del nivel $5'S$, como indicamos anteriormente, son los obtenidos teóricamente de la aproximación DWPO para 200 eV y medidos en el máximo y a 100 eV por medio de la función de excitación hallada experimentalmente. Por medio de la razón de ramificación se obtuvo la sección eficaz parcial de la línea de 4.437 \AA que fue comparada con las otras líneas en estudio. Los valores presentados por Moustafá Moussa (9) resultan relativamente inferiores a los demás, posiblemente debido a factores correctivos demasiado altos.

El error experimental debido a las correcciones por cascada, error en la medida absoluta de la presión y comparación con la línea patrón de estas secciones eficaces, es del orden del 10%.

Dentro de la discrepancia habitual observada en este tipo de medidas en donde intervienen no solamente efectos secundarios susceptibles de modificaciones, sino además problemas de calibración cuidadosa, puede concluirse que los resultados obtenidos están en completo acuerdo con las demás medidas experimentales.

TABLA VIII

Sección eficaz de excitación de algunos niveles del Helio.

 $(\times 10^{-20} \text{ cm}^2)$

I - Valores en el máximo

Nivel	4's	5's	4 ³ S	3 ³ P	Error Exp. E(eV)	Observaciones
(13)	17.3	-	23.3	74	10% 50	
(45)	23.	11	35.	-	- máximo	sin corregir
(43)	24.	9.2	35.	97	- "	" "
(46)	20.	7.7	25.	83	- "	" "
(47)	27.5	10.	37.	105	"	" "
(48)	-	5.9	36.	80	"	" "
(10)	18.5	8.47	31.6	63.7	7% "	
este tra bajo.	20.9	8.33*	24.7	91.0	10% "	corregido cascada

II - Valores a 100 eV

(9)	8.5	3.88	2.27	7.75	10% 100	correg.casc.y polariz.
(11)	16.5	7.0	4.4	11	10% 108	sin corregir
(11)	16.2	7.0	3.4	7.3	15% 108	corregida
(43)	15	6.1	3.3	15.3	- 108	
(13)	10.6	-	2.35	9.2	10% 100	sin corregir
(10)	11.3	5.1	1.88	8.15	7% 100	
este tra bajo.	13.6	4.9*	2.7	12.3	10% 100	corregido cascada

*Estos valores están hallados a partir de los teóricos, utilizando los valores obtenidos de la función de excitación.

CAPITULO IV

ESTUDIO EXPERIMENTAL Y TEORICO DEL NEON

La primera contribución al estudio de las funciones de excitación del Ne fueron hechas por Hanle en 1930 (49) quien estudió las funciones de excitación de algunos niveles a presiones altas. También otros autores lo estudiaron en 1935 y 1940. Pero resulta imposible valorar esos datos debido a las altas presiones utilizadas que dan lugar a problemas de atrape radiativo y desexcitación colisional importante. Además los resultados son muy escasos para poder hacer una comparación.

Los resultados obtenidos en las dos últimas décadas son más importantes porque se hicieron a presiones bajas para reducir efectos secundarios. Zapersochnyi y Feltsan (50) estudiaron las funciones de excitación de tres líneas espectrales pertenecientes a la serie $2p \rightarrow 1s$. Finalmente Sharpton y colaboradores (51) trataron el tema con gran amplitud, siendo casi los únicos que dan una tabla completa de resultados de varias familias de líneas. Parece que son pues los únicos con los que las medidas realizadas por nosotros pueden compararse.

El estudio del Neon resulta de gran importancia por sus varias aplicaciones. Tiene también gran interés por el gran número de estados que pueden estudiarse por el método óptico. Pero su principal importancia radica en que permite comprobar si las conclusiones generales deducidas de los estudios realizados con el He se pueden extender a los átomos más pesados. La comprobación de la validez de la teoría permitiría conocer de una manera razonablemente aproximada, la magnitud de la sec-

ción eficaz de excitación de un gran número de estados y su variación con la energía. También podrían utilizarse los resultados de los trabajos con el Ne como base para estudiar los gases nobles más pesados y otros átomos que también presenten un tipo de acoplamiento intermedio (51).

A causa de lo complejo de su estructura atómica, los cálculos teóricos de la función de excitación son más difíciles que en el Helio.

IV.1.- ESTRUCTURA DEL NEÓN

La configuración electrónica del estado fundamental del Ne neutro es $1s^2 2s^2 2p^6$. Los estados excitados son debidos a configuraciones $2p^5 n l$ siendo n el número cuántico principal y l el número cuántico de momento angular orbital.

La configuración spin-órbita de la capa casi cerrada es predominante en esta configuración y origina una separación de los estados excitados que se dividen en dos grupos con apariencia de dobletes: El grupo superior de energía, que tiene como límite el nivel $^2P_{1/2}$ del ión y el inferior que tiene el nivel $^2P_{3/2}$ como límite.

Mientras que la interacción spin-órbita de la capa casi cerrada es constante en todas las configuraciones, la interacción spin-órbita del electrón óptico y la capa casi cerrada $2p$ disminuye mucho cuando aumenta n .

Para todos los niveles del Ne I se utiliza el acoplamiento jK , sugerido por Racah. La capa $2p^5$ da lugar a niveles $^2P_{1/2}$ ó $^2P_{3/2}$ en acoplamiento jK . El momento angular total j_1 de la capa $2p^5$ (que puede valer $1/2$ ó $3/2$), se compone con el momento orbital del electrón óptico (l_2), dando como resultado el número cuántico intermedio (K) que a su

vez se compone con el spin de dicho electrón óptico ($s_2 = 1/2$) y su resultante es el momento angular total del átomo (J). Lo cual esquemáticamente representamos por:

$$|(s_1 l_1) j_1, l_2 | K, s_2 | J$$

En este acoplamiento la notación espectroscópica de un nivel es $n l_2(K)_J$ y según el nivel procede del término padre $^2P_{1/2}$ ó $^2P_{3/2}$, a la letra que designa el momento orbital del electrón óptico, se le coloca una prima o no.

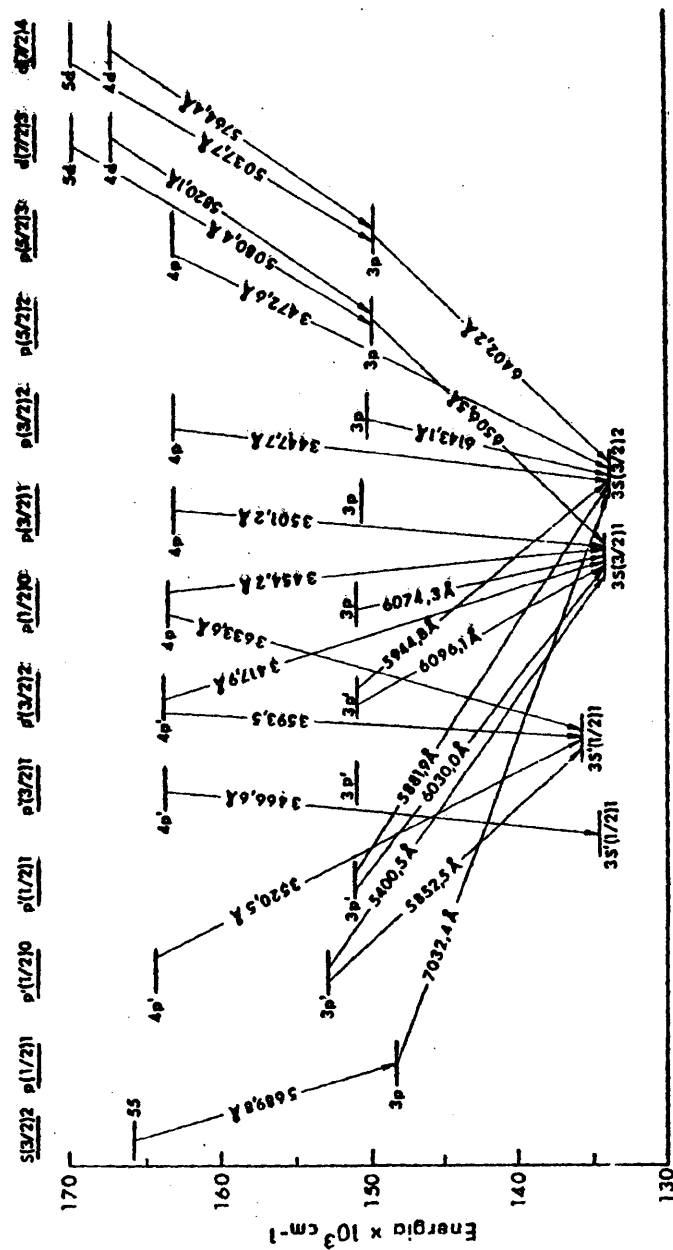
En la figura (40) se muestra el diagrama de Grotian de las principales transiciones del Ne. En él se encuentran señaladas las líneas que serán objeto del presente estudio.

IV.2.- RESULTADOS OBTENIDOS PARA EL NEON

La medida de la sección eficaz de excitación de algunos niveles del Ne se va a realizar utilizando el mismo método experimental que en el caso del nitrógeno y el Helio.

Se trataron las funciones de excitación y se midió la intensidad de luz emitida en función de la presión. Se aplicaron las correcciones necesarias y se utilizó el nivel 5'S del He como patrón.

Las probabilidades de transición fueron calculadas teóricamente pues los valores tabulados no parecían ser muy exactos.



IV.2.1.- Medida de la sección eficaz de excitación del nivel $3p' | 1/2 |_0$. (Paschen $2p_1$) .

Para la medida de la función de excitación del nivel $3p' | 1/2 |_0$ se tomó la transición $3p' | 1/2 |_0 \rightarrow 3s' | 1/2 |_1$, de una longitud de onda de 5.852 \AA .

Se obtuvo la función de excitación desde el umbral hasta 400 eV a distintas presiones. En la Fig. (41) se muestran los resultados obtenidos y se comparan con el de Sharpton y col. (51). Las funciones de excitación tienen un máximo hacia los 50 eV y disminuyen suavemente a medida que crece la energía de los electrones. En la Fig. (42) se muestran las mismas funciones de excitación en escala $\log I - \log E$, obteniéndose una pendiente de -0.84 . A partir de 300 eV la representación anterior se separa ligeramente de una recta, posiblemente debido a un efecto de población por cascada, que será estudiado a continuación. La curva de la referencia (51) solo llega hasta los 200 eV , por lo que no se puede comparar a partir de esa energía, no obstante los datos obtenidos hasta 200 eV están en completo acuerdo en cuanto a la forma de la función de excitación.

Las medidas realizadas de la luz emitida en la transición en función de la presión, muestran una variación lineal que se prolonga hasta los 20 mtorr y que pasa por el origen. Esto nos indica que no existen procesos secundarios de atrape radiactivo ni desexcitación colisional.

Para corregir por el perfil instrumental, se midió la anchura de la línea en el analizador multicanal y se comprobó que tenía la misma relación Área/intensidad máxima que la línea del Helio, como se muestra en la Fig. (43), tal como era de esperar en líneas atómicas, por lo que no fue necesario hacer ninguna corrección en este sentido.

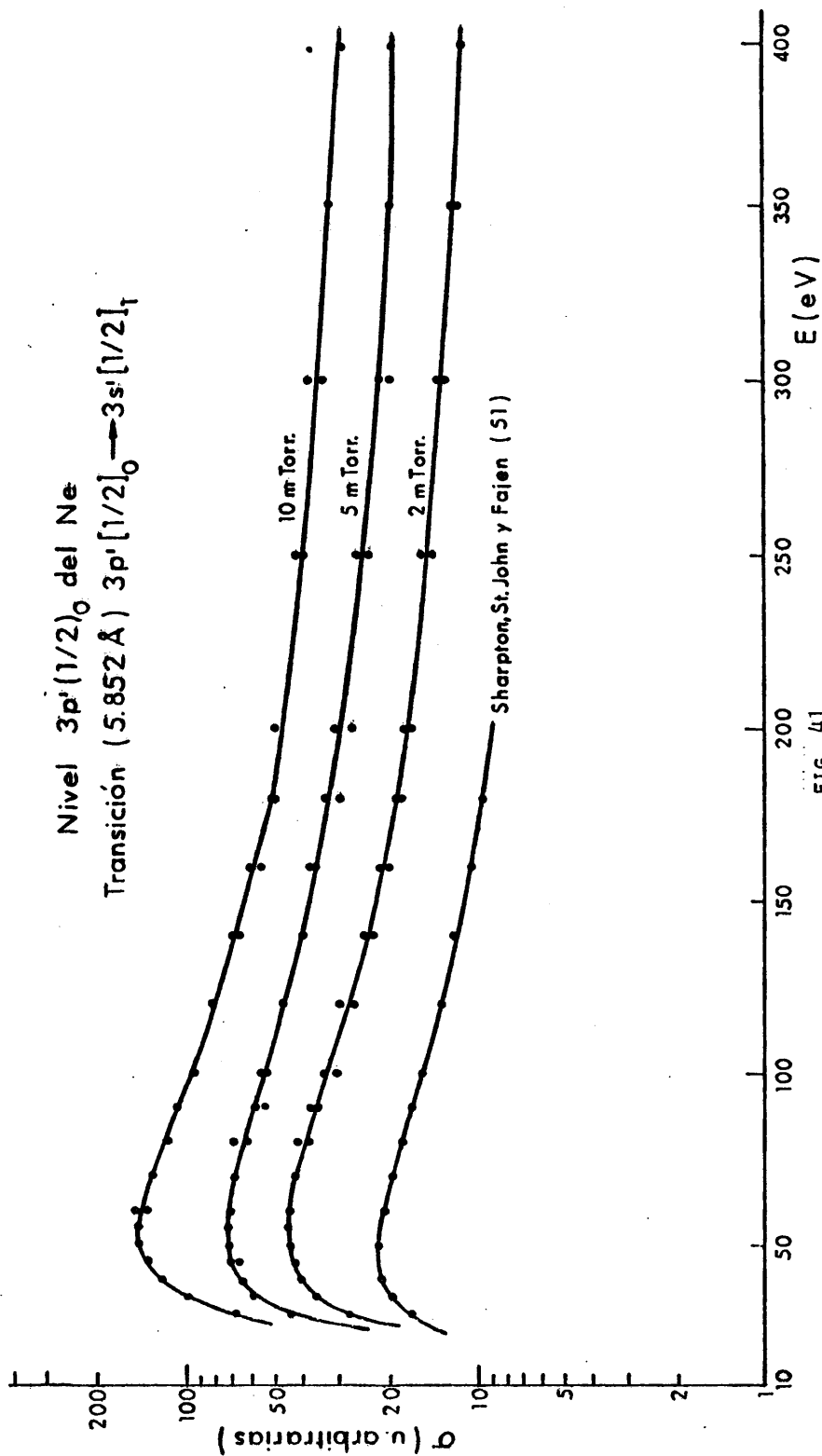


FIG. 41

FUNCIÓN DE EXCITACIÓN

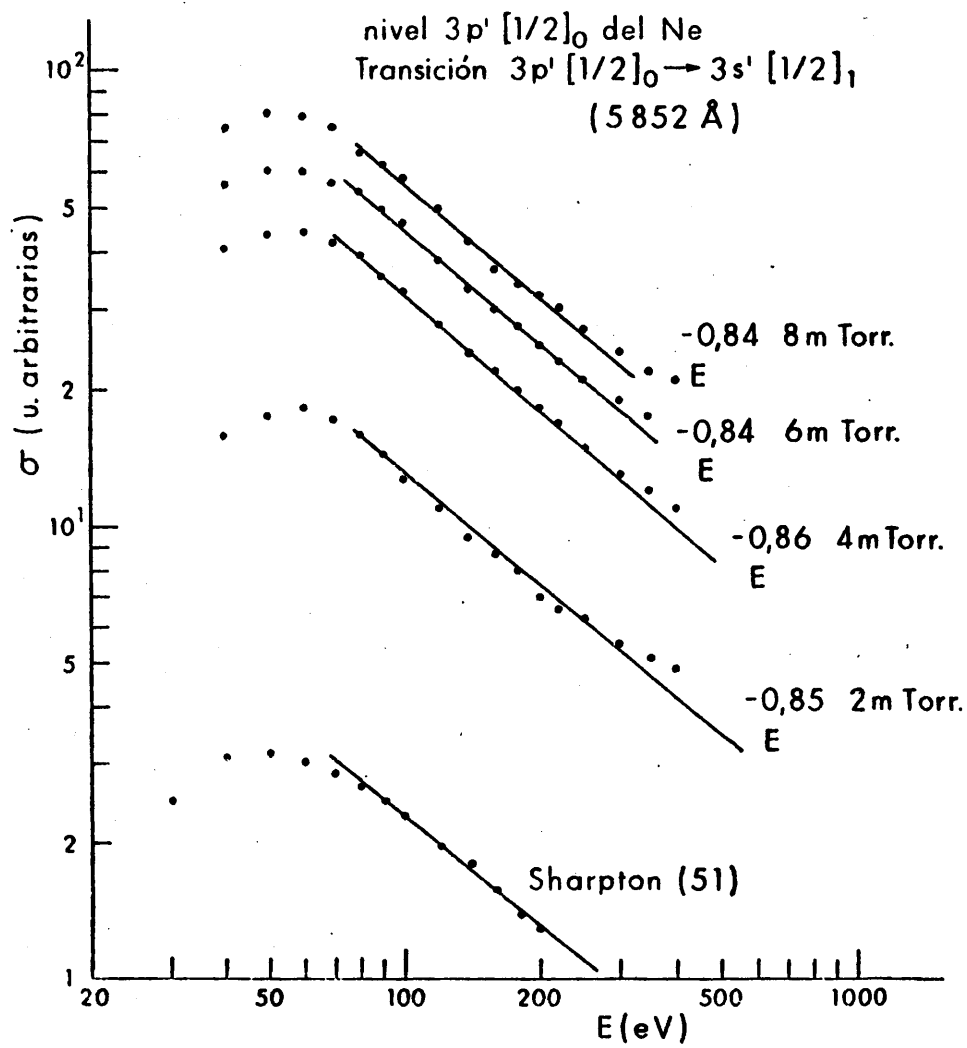


FIG. 42

FUNCIÓN DE EXCITACIÓN (LOG I - LOG E).

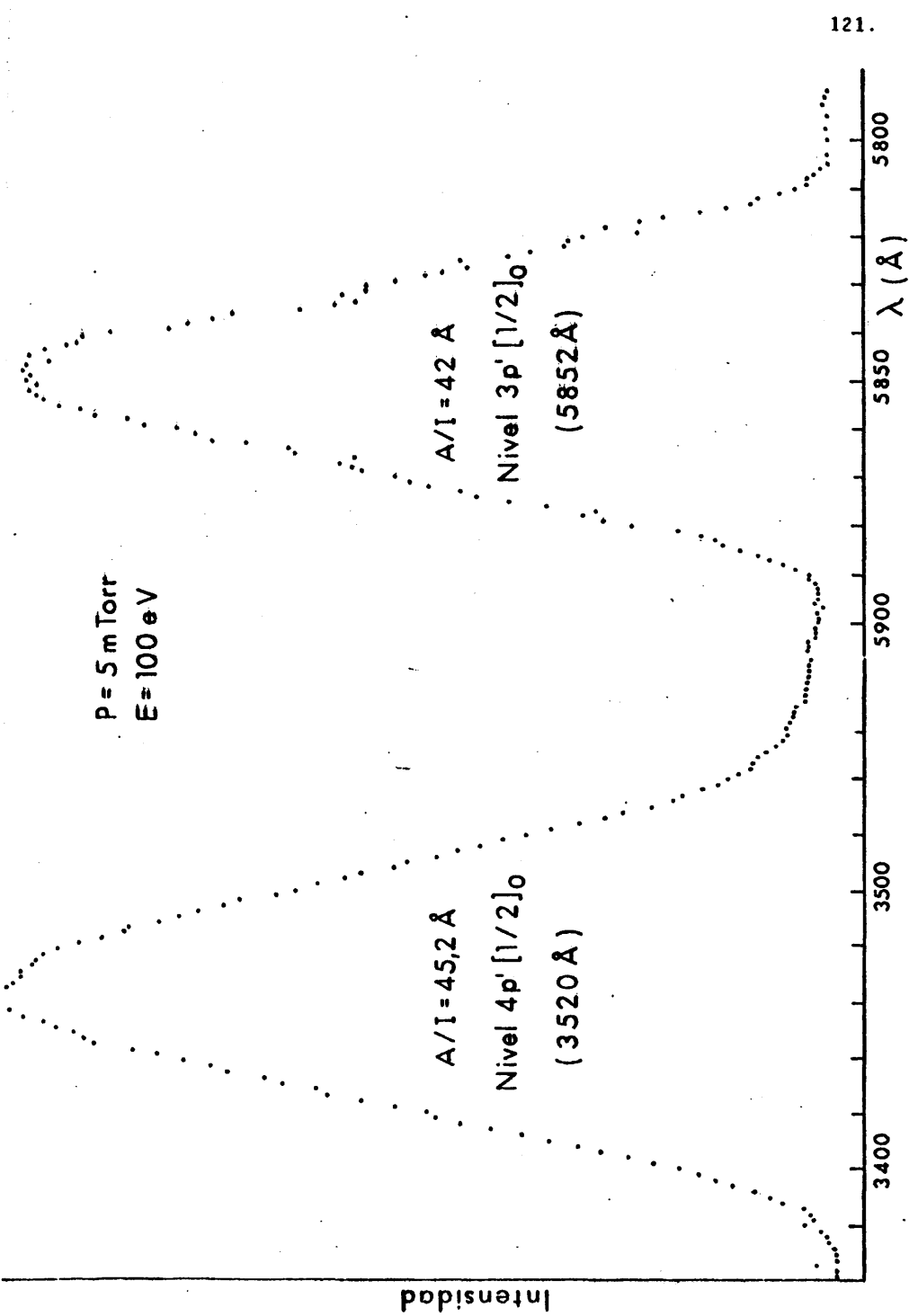


FIG. 43.- RELACIÓN A/I_{MAX} EN NE.

IV.2.1.1.- Corrección por cascadas.

Para corregir la posible población por cascada que tu tuviese la transición, se aplicó el método descrito anteriormente para la medida de desexcitación. El nivel del que par te la transición de 5.852 \AA tiene una vida media de 14 ns y se observó una componente de cascada de vida media de 500 ns . La influencia de esta componente en la intensidad luminosa total es del 4% . En la Fig. (44) se muestran los resultados obtenidos, realizados a 10 mtorr de presión y 100 eV de energía.

IV.2.1.2.- Resultados obtenidos

Con los resultados obtenidos y relacionados con la línea $5'S$ del Helio se obtuvo una sección eficaz parcial para esa transición a 100 eV de

$$\sigma(3p' | 1/2 |_0 \rightarrow 3s' | 1/2 |_1) = 2.02 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$$

Con este valor y mediante la función de excitación se obtienen los valores para 200 eV y en el máximo (60 eV) siguientes

$$\sigma(3p' | 1/2 |_0 - 3s' | 1/2 |_1) = 2.72 \times 10^{-18} \text{ cm}^2 \quad \text{en el máximo}$$

$$\sigma(3p' | 1/2 |_0 - 3s' | 1/2 |_1) = 1.04 \times 10^{-18} \text{ cm}^2 \quad \text{a } 200 \text{ eV} .$$

Esta línea no tiene ninguna otra transición que parta del mismo nivel, por lo que la razón de ramificación vale $\beta_{ij} = 1$.

De modo que la sección eficaz parcial es igual a la sección eficaz del nivel en estudio.

$$\sigma(3p' | 1/2 |_0) = 2.02 \times 10^{-18} \text{ cm}^2 \quad \text{a } 100 \text{ eV} .$$

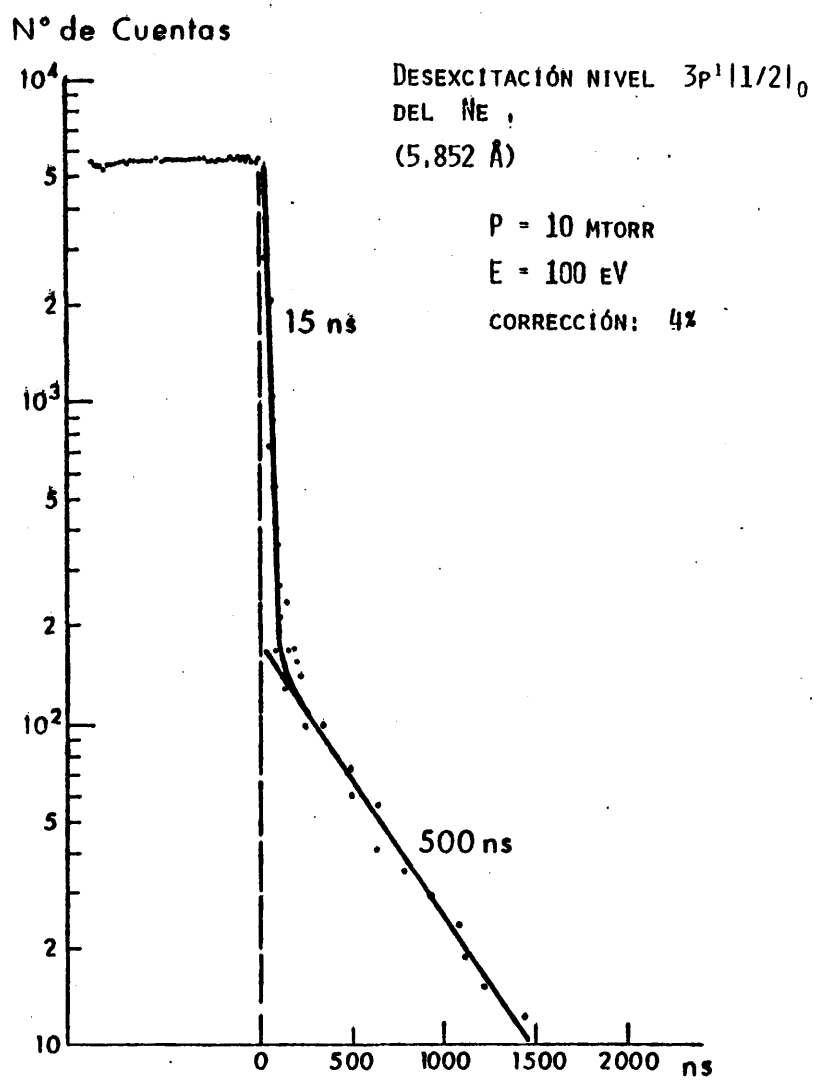


FIG. 44

IV.2.2.- Medida de la sección eficaz de excitación del nivel $4p' | 1/2 |_0$ (Paschen $3p_1$).

Para medir la sección eficaz de excitación del nivel $4p' | 1/2 |_0$ se tomó la transición $4p' | 1/2 |_0 \rightarrow 3s' | 1/2 |_1$ correspondiente a 3.520 \AA . En este caso la red de difracción para el margen visible tiene una eficiencia muy pequeña, como puede verse en la Fig. (10) y puede introducir mayor error que en otros tramos de longitud de onda, por lo que se utilizó la red del ultravioleta. Como en el caso de la línea de 3.889 \AA del He, se midió el factor de corrección que fue necesario aplicarle debido a la diferencia de eficiencias entre las dos redes. En este caso dio un factor de corrección de 1.64 .

Las funciones de excitación trazadas desde el umbral hasta los 400 eV se muestran en la Fig. (45) a diferentes presiones, y presentan una forma muy similar a los del estado $3p' | 1/2 |_0$. De la representación doble logarítmica de la Fig. (46), se deduce que la forma de las funciones de excitación de los estados $3p' | 1/2 |_0$ y $4p' | 1/2 |_0$ se puede representar por la expresión $E^{-0.85}$ a partir del máximo. Esta forma es la prevista en los cálculos teóricos utilizando la primera aproximación de Born, como demostraron Sharpton y col. (51) y como veremos posteriormente en nuestros cálculos teóricos.

La relación entre la intensidad luminosa y la presión, mostrada en la Fig. (47) es una recta que pasa por el origen hasta 16 mtorr , lo que nos asegura la ausencia de efectos secundarios.

La forma de la línea fue analizada junto con la del estado $3p' | 1/2 |_0$ y poseen ambas la misma relación Area/intensidad máxima que la de los niveles del Helio, como se mostró en la Fig. (43).

Nivel $4p'[1/2]_0$ del Ne
 Transición $4p'[1/2]_0 \rightarrow 3s'[1/2]_1$
 (3520 Å)

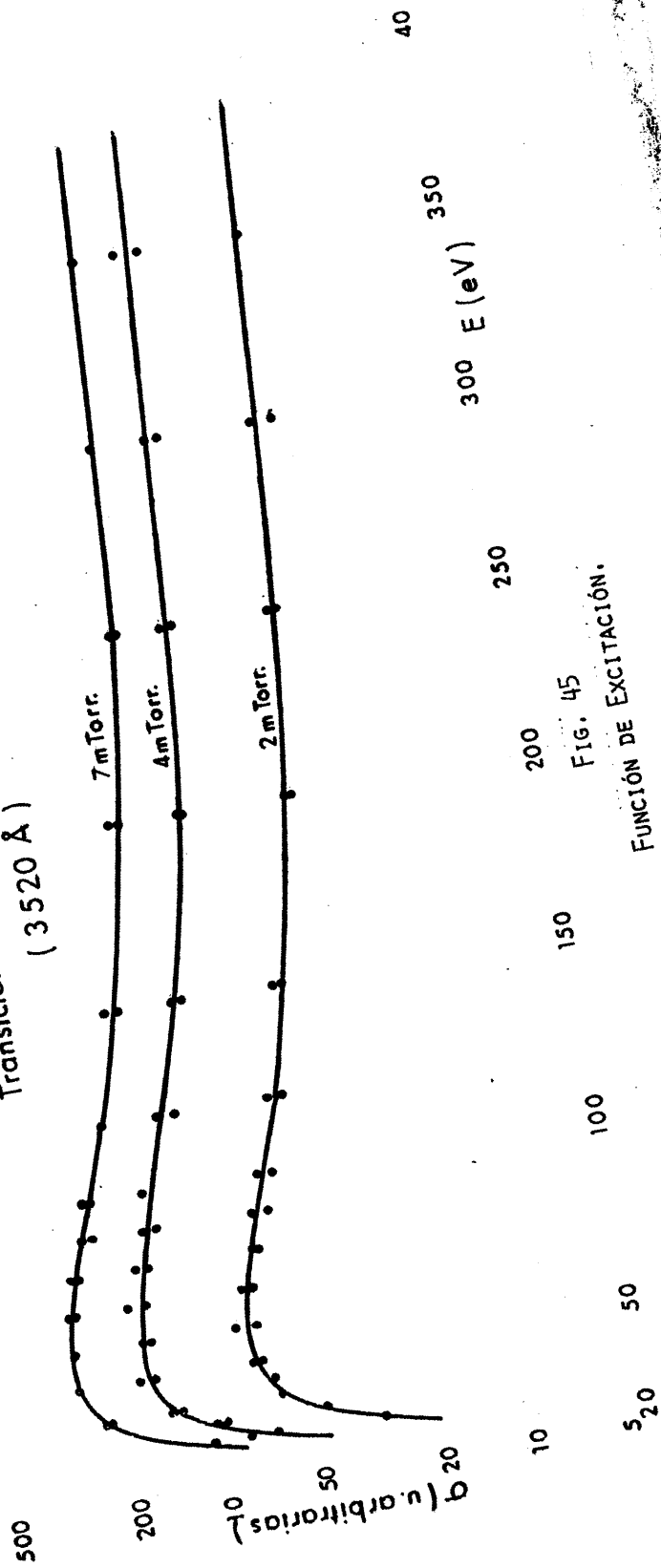


FIG. 45
 FUNCIÓN DE EXCITACIÓN.

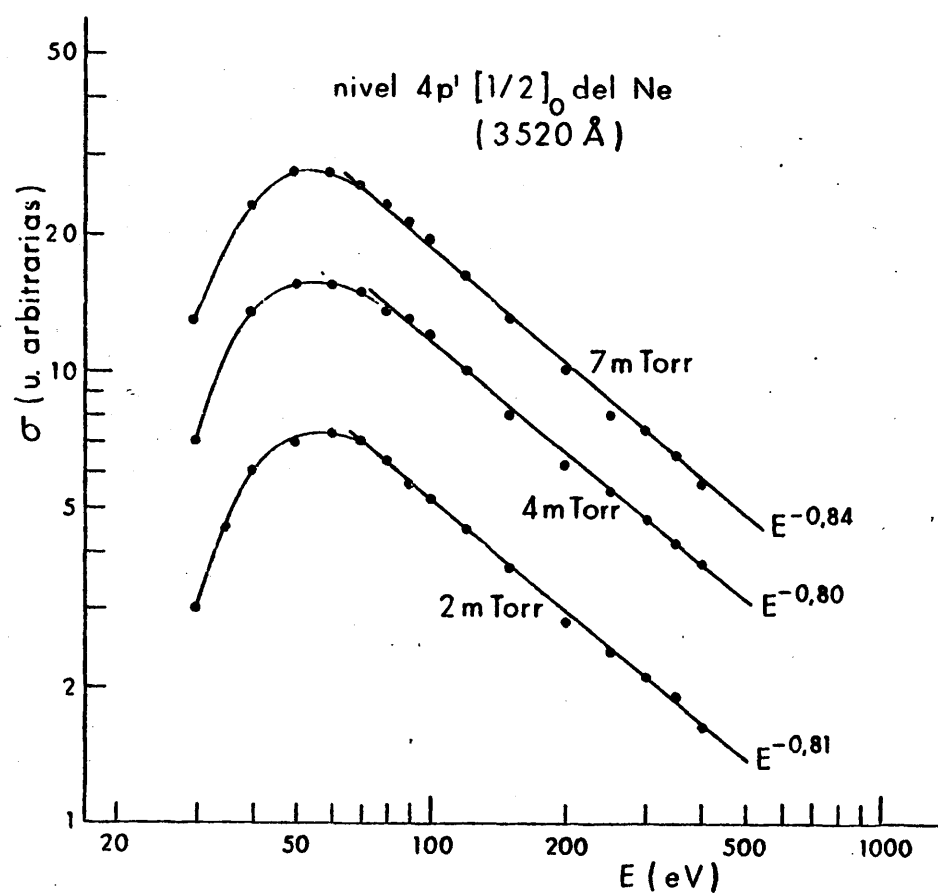


FIG. 46

FUNCIÓN DE EXCITACIÓN (LOG I - LOG E) .

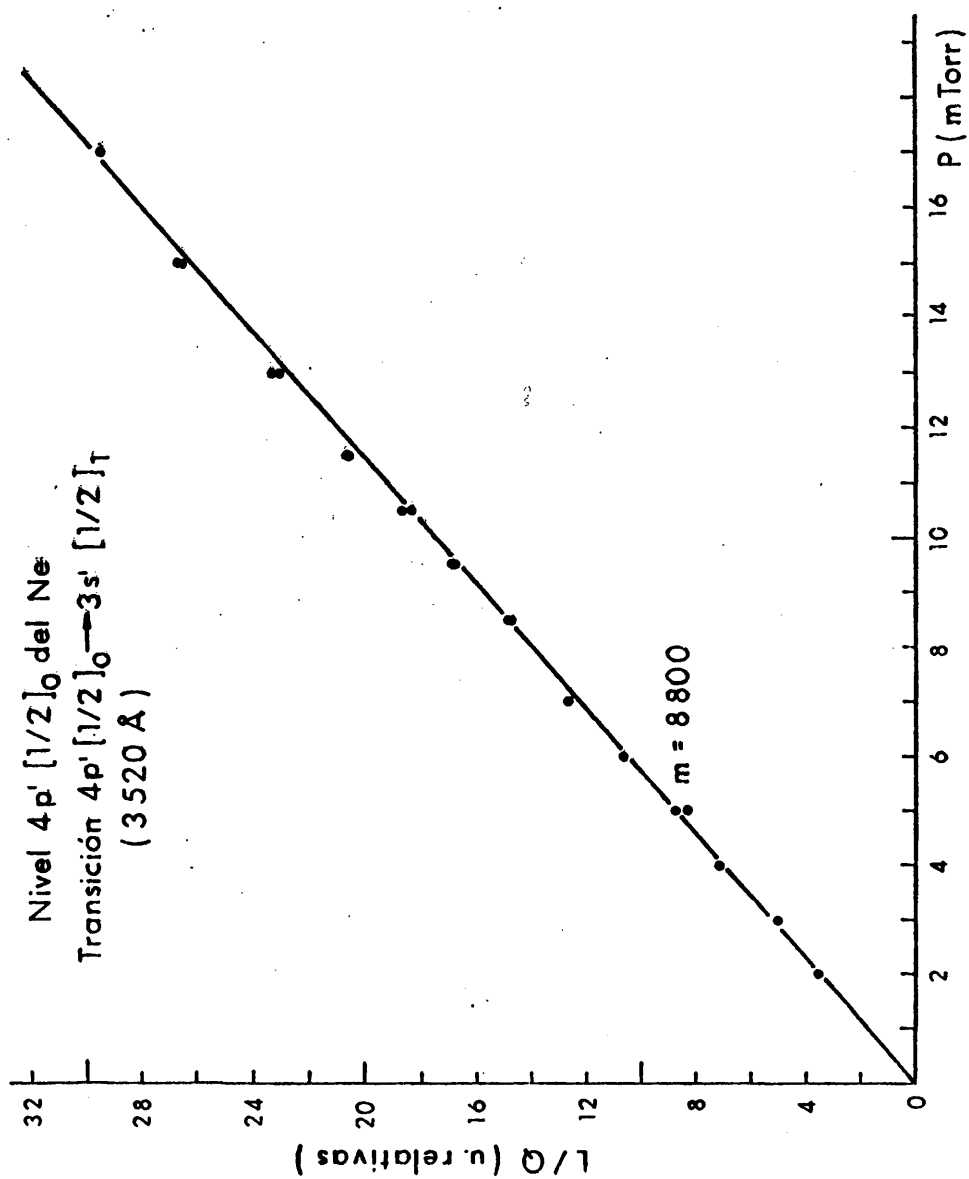


FIG. 47.- RELACIÓN INTENSIDAD - PRESIÓN.

IV.2.2.1.- Corrección por cascadas.

Siguiendo el mismo procedimiento utilizado hasta ahora se midió la intensidad de luz en la desexcitación del nivel para hallar la componente de cascada, en el caso de que la tuviera.

Se realizaron las medidas con una energía de 100 eV y 10 mtorr de presión. La transición de la 3.520 \AA tiene una vida media de 61 ns. Se colocó un convertidor tiempo amplitud de margen amplio (15 μs) para poder detectar componentes de vida media larga. Se observaron dos componentes de cascada, una con vida media de 2.4 μs y otra con 348 ns. Ambas tenían poca influencia en la vida media del nivel y el descuento corregido fue del 6% de la intensidad total. Ver Fig. (48).

IV.2.2.2.- Resultados obtenidos

Con los valores obtenidos se obtuvo un resultado para la sección eficaz parcial de la transición de

$$\sigma 4p' |1/2|_0 - 3s' |1/2|_1 = 19.07 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ a } 100 \text{ eV}$$

Las razones de ramificación fueron calculadas teóricamente a partir de las probabilidades de transición, tal como se explicará más adelante, dando por resultado $\beta_{ij} = 0.442$, con lo cual se obtuvo un valor para la sección eficaz de excitación del nivel de

$$\sigma 4p' |1/2|_0 = 43.14 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ a } 100 \text{ eV}$$

Aplicando los valores obtenidos de las funciones de excitación se obtienen los valores correspondientes al máximo y a 200 eV dando los resultados siguientes:

N° de Cuentas

DESEXCITACIÓN DEL NIVEL $4p^1|1/2|_0$
 DEL He ,
 TRANSICIÓN $4p^1|1/2|_0 \rightarrow 3s^1|1/2|_1$
 (3.520 Å)

P = 10 MTORR

E = 100 eV

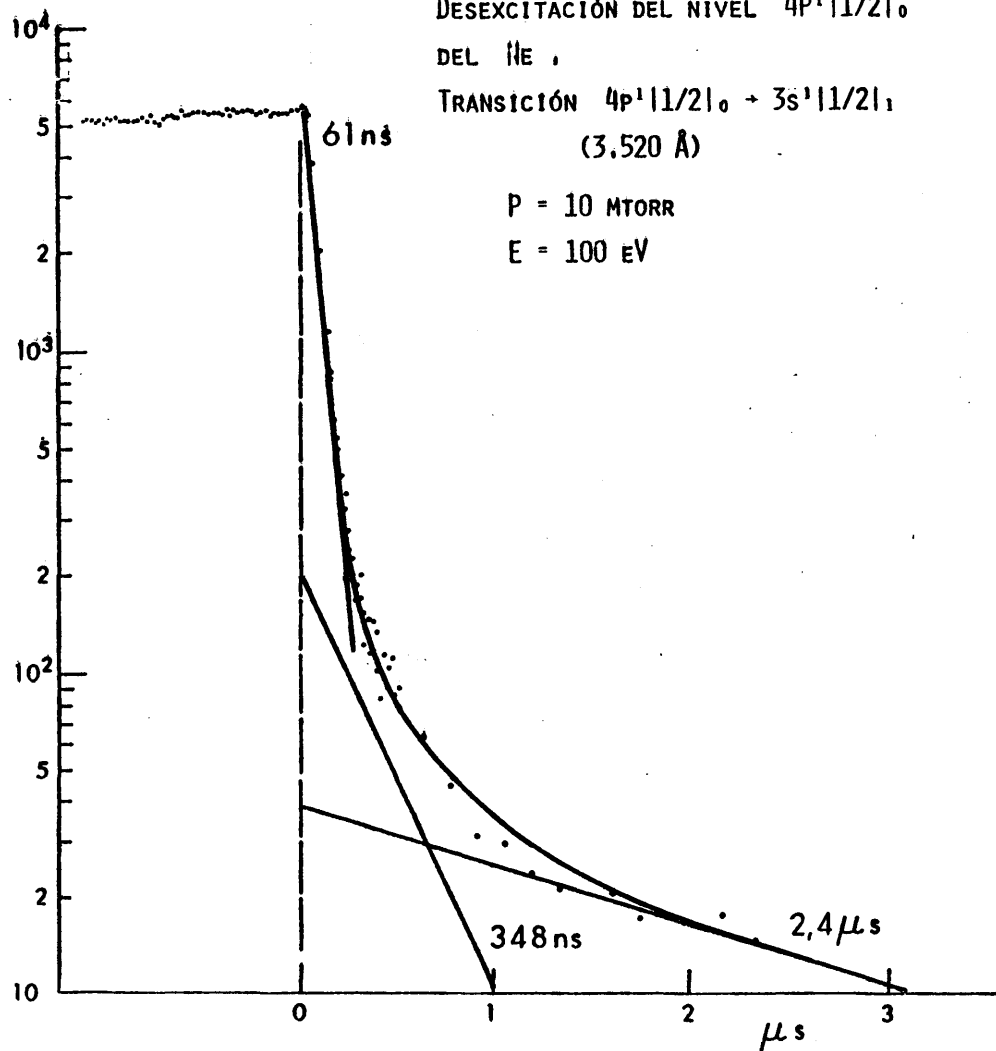


FIG. 48

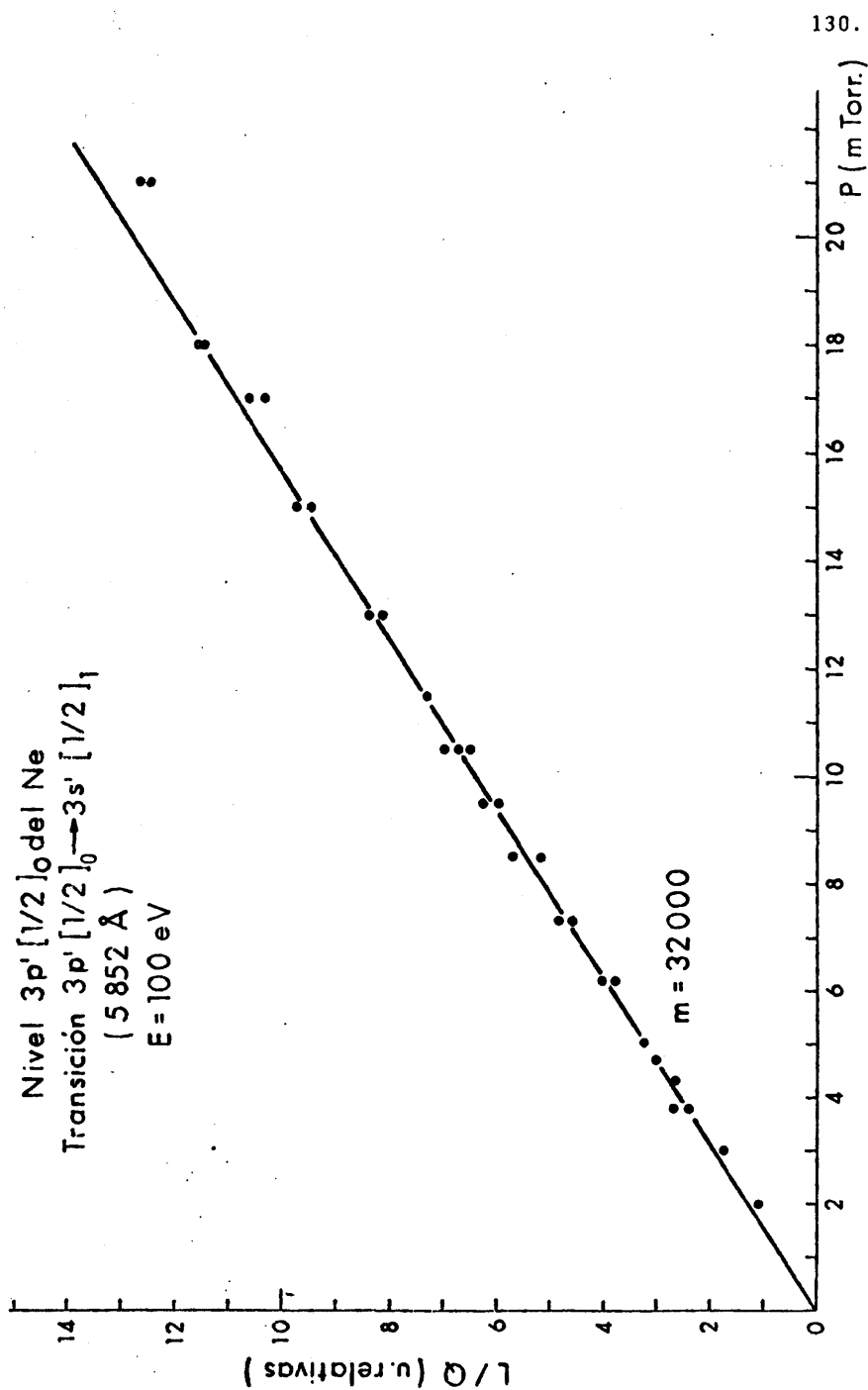


FIG. 49.- RELACIÓN INTENSIDAD-PRESIÓN

TABLA IX

Sección eficaz parcial de desexcitación de las transiciones del Ne
 $\times 10^{-20} \text{ cm}^2$

Transición $3p' | 1/2 |_0 - 3s' | 1/2 |_1$
 (5.852 Å)

ref.	máx.	100 eV	200 eV	Error exp.*
(51)	225	168	-	10%
(52)	172	-	-	-
este trab.	272	202	104.0	10%

Transición $4p' | 1/2 |_0 - 3s' | 1/2 |_1$
 (3.520 Å)

(51)	-	12	-	18%
este trab.	26.7	19	9.84	10%

0 --- 0 --- 0

Sección eficaz de excitación de los niveles del Ne
 $\times 10^{-20} \text{ cm}^2$

nivel $3p' | 1/2 |_0$

ref.	máx.	100 eV	200 eV
(51)	218	160	90
este tra.	272	202	104

nivel $4p' | 1/2 |_0$

(51)	-	64	41
este trab.	60.4	43.14	22.7

* Este error viene dado por la suma cuadrática del error sistemático y error estadístico.

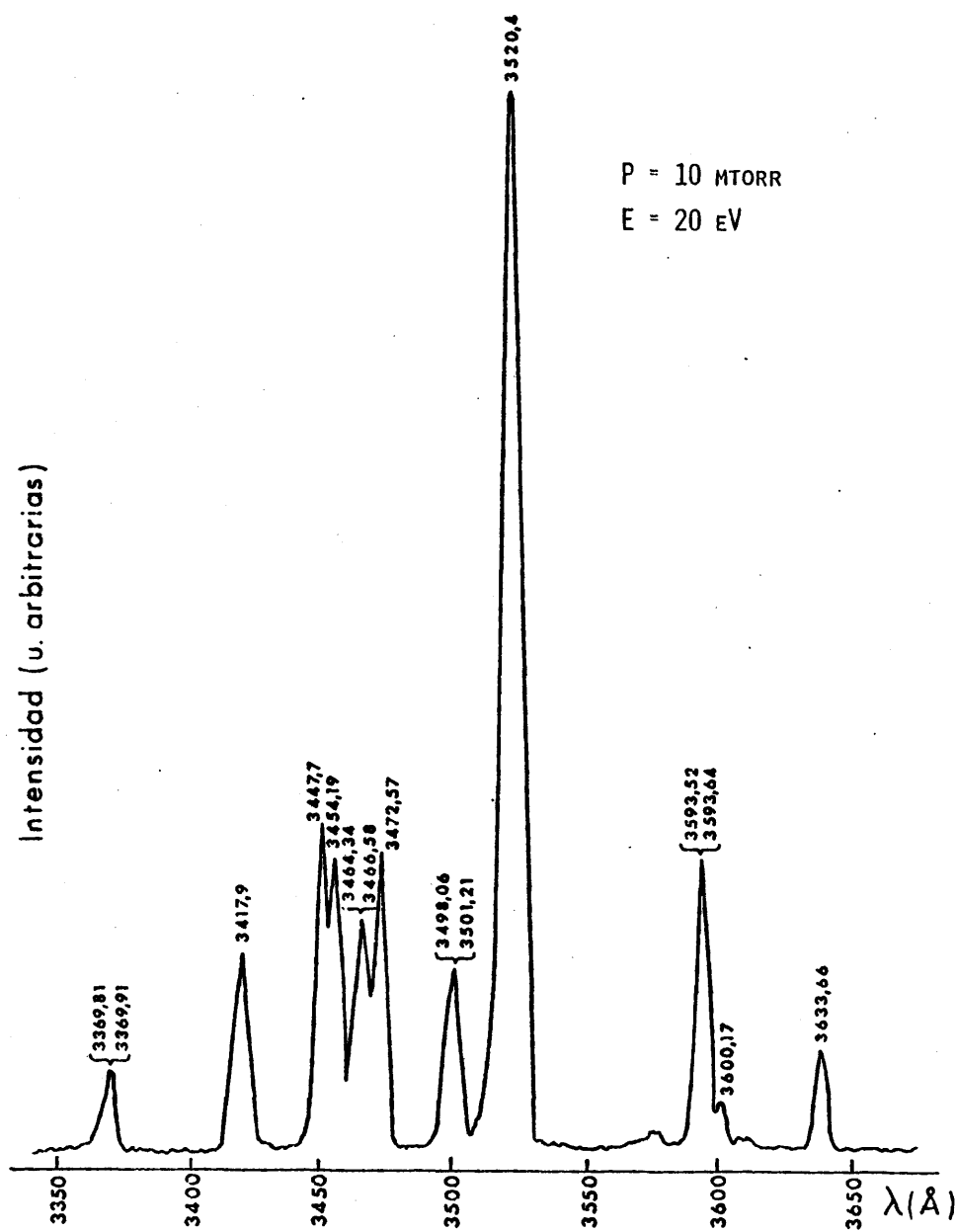


Fig. 50-A

ESPECTRO DEL HE (3350 Å - 3670 Å)

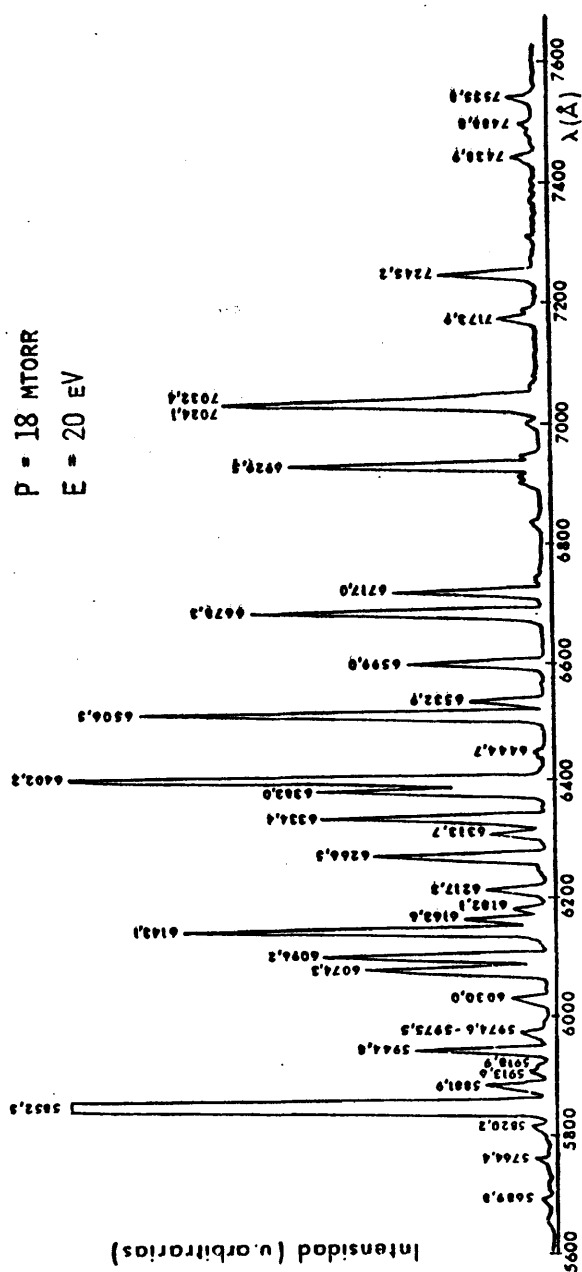


Fig. 50-b

ESPECTRO DEL NEI (5600 Å - 7600 Å)

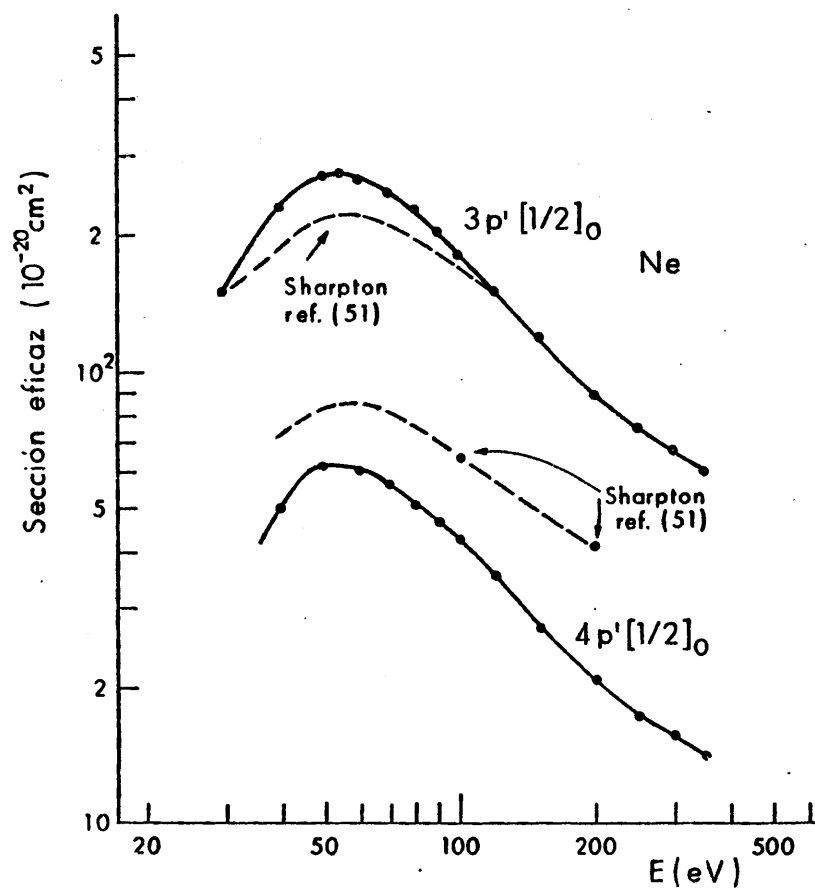


FIG. 51

SECCIÓN EFICAZ DEL NE (LOG I - LOG E) . COMPARACIÓN
REF. (51).

$$\sigma_{4p' | 1/2|_0} = 60.4 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \quad (\text{a } 60 \text{ eV})$$

$$\sigma_{4p' | 1/2|_0} = 22.7 \times 10^{-20} \text{ cm}^2 \quad \text{a } 200 \text{ eV}.$$

IV.3.- CÁLCULO TEORICO DE LA SECCION EFICAZ DE EXCITACION PARA EL ÁTOMO DE Ne .

IV.3.1.- Colisiones inelásticas.

Para calcular la sección eficaz inelástica, utilizamos la aproximación de Born. Utilizando la segunda regla de oro de Fermi, en donde la probabilidad de transición entre dos estados del átomo viene dada por

$$dW = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{ak, a_0 k_0}|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_0) d\mathbf{k} \quad (\text{IV.1})$$

siendo a_0 el estado inicial del átomo antes de la colisión con energía E_0 ,

a = el estado excitado final de energía E_n ;

k_0 = vector de ondas del electrón incidente

k = " " " " " saliente

y las energías totales ϵ_0 y ϵ vienen dadas por

$$\epsilon_0 = E_0 + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \quad (\text{IV.2})$$

$$\epsilon = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{IV-2})$$

El potencial de interacción $V(r)$ debido a la acción del núcleo y los electrones es

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_{i=1}^Z \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} \quad (\text{IV-3})$$

en el estudio de átomos neutros, el número de electrones vendrá

dato por Z , teniendo en cuenta (IV-1) y (IV-2)

$$\delta(\epsilon - \epsilon_0) = \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}\right) + (E_n - E_0) = \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}\right) \quad (\text{IV.4})$$

en donde hemos llamado

$$k_n^2 - k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - E_n)$$

por tanto

$$k_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - E_n) + k_0^2} \quad (\text{IV.5})$$

Como en realidad $dW = \phi \cdot d\sigma$ donde ϕ es el flujo de partículas y $d\sigma$ la probabilidad de colisión o sección eficaz, podemos poner teniendo en cuenta (IV.1) y (IV.4) se obtiene que

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{k_n}{k_0} \left| \int_V e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k}_n) \cdot \vec{r}} \left(\int_V \phi_n^*(r_1 \dots r_z) \cdot \right. \right. \quad (\text{IV.6})$$

$$\left. \cdot \left(-\frac{Ze^2}{r} + \sum_{i=1}^N \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} \right) \phi_0(r_1 \dots r_z) (d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_z) d\vec{r} \right|^2 d\Omega$$

llamando $\vec{k}_0 - \vec{k}_n = \vec{k}$ y utilizando la conocida igualdad de Bethe

$$\int \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{V(r) |\vec{r} - \vec{r}_i|} d^3\vec{r} = \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \quad (\text{IV.7})$$

resulta en definitiva,

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{k_n}{k_0} \left| \frac{4\pi e^2}{k^2} \int_{r_1 \dots r_z} \phi_n^* \sum_{i=1}^Z e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \phi_0 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_z \right|^2 d\Omega \quad (\text{IV.8})$$

Para poder integrar esta expresión es necesario separar la parte radial y la angular.

Para ello expresamos $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}$ en función de las funciones esféricas de Bessel,

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_1} = \sum_{\chi=0}^{\infty} (2\chi+1) i^{\chi} J_{\chi}(\rho) P_{\chi}(\cos\theta_k) \quad (IV.9)$$

A su vez los polinomios de Legendre se ponen en función de los armónicos esféricos, es decir, de la forma

$$P_{\chi}(\cos\theta_k) = \frac{4\pi}{2\chi+1} \sum_{\mu=-\chi}^{\chi} Y_{\chi\mu}^*(\theta_k, \phi_k) \cdot Y_{\chi\mu}(\theta_1, \phi_1) \quad (IV.10)$$

Extendiendo la sumatoria para todos los electrones del átomo que da (IV.9) de la forma

$$\sum_{i=1}^Z e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} = \sum_{\chi=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\chi}^{\chi} i^{\chi} \cdot \sqrt{4\pi(2\chi+1)} Y_{\chi\mu}^*(\theta_k, \phi_k) \sum_{i=1}^Z J_{\chi}(kr_i) \cdot \sqrt{\frac{4\pi}{2\chi+1}} Y_{\chi\mu}(\theta_1, \phi_1) \quad (IV.11)$$

siendo J_{χ} la función de Bessel esférica de orden χ . En donde la expresión

$$\sum_{i=1}^Z J_{\chi}(kr_i) \sqrt{\frac{4\pi}{2\chi+1}} Y_{\chi\mu}(\theta_1, \phi_1) \quad (IV.12)$$

la representaremos de ahora en adelante por $T_{\chi\mu}$ que es un operador tensorial de orden χ .

Suponiendo el caso más general en que el estado atómico está descrito por los números cuánticos γJM , donde J es el momento angular, M su proyección sobre z y γ el conjunto de números cuánticos que además definen el estado, tendremos que

$$a_0 \equiv \gamma_0 J_0 M_0 \quad y \quad a \equiv \gamma JM$$

Sumando sobre todos los valores de M y de M_0 , teniendo en cuenta las propiedades de ortogonalidad de los armónicos esféricos el teorema de Wigner-Eckart, las correspondientes expresiones de

Racah y dividiendo por el peso estadístico del nivel desde el que se realiza la excitación $g_0 = 2J_0 + 1$ (56) se obtiene

$$\frac{1}{g_0} \sum_{M_0} \left| \left\langle \phi_n^* \sum_i e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} \phi_0 \right\rangle \right|^2 = \frac{1}{g_0} \left\{ \sum_{x=0}^{\infty} (2x+1) \cdot |\langle \gamma J || T_x || \gamma_0 J_0 \rangle|^2 \right\} \quad (\text{IV.13})$$

Para cada caso concreto el número de términos x que contribuye no es muy largo, por otra parte el término $|\langle \gamma J || T_x || \gamma_0 J_0 \rangle|^2$ se puede expresar en Algebra de Racah.

Introduciendo (IV.13) en (IV.8) resulta

$$d\sigma = \frac{4\pi m^2 e^4}{\hbar^4 g_0} \cdot \frac{K_n}{K_0} \left\{ \sum_{x=0}^{\infty} (2x+1) |\langle \gamma J || T_x || \gamma_0 J_0 \rangle|^2 \frac{d\Omega}{K^4} \right\} \quad (\text{IV.14})$$

Teniendo en cuenta las direcciones de K_n y K_0

$$K^2 = k_0^2 + k_n^2 - 2 k_0 k_n \cos \theta$$

Como

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta = \frac{2\pi K dk}{k_0 k_n} \quad (\text{IV.15})$$

Sustituyendo los valores de k_n , e integrando respecto a K , en (IV.14) se obtiene para la sección eficaz total

$$\sigma = \frac{8\pi m^2 e^4}{\hbar^4 g_0 k_0^2} \int_{K_{\min.}}^{K_{\max.}} \sum_{x=0}^{\infty} (2x+1) |\langle \gamma J || T_x || \gamma_0 J_0 \rangle|^2 \frac{dK}{K^3} \quad (\text{IV.16})$$

En esta expresión está incluido en el elemento de matriz la parte

angular y la radial. Para separar ambas partes hay que tener en cuenta el tipo de acoplamiento que se va a utilizar para describir los estados atómicos en estudio.

Supongamos el acoplamiento Russell-Saunders, en donde el electrón que participa en la transición se acopla con el resto de la corteza atómica (core) de números cuánticos de espín y momento orbital S_c y L_c ; a_c designa el resto de los números cuánticos. Esquemáticamente la transición se representa

$$[a_c S_c L_c] 1_0 S_0 L_0 J_0 \rightarrow [a_c S_c L_c] 1 S_0 L J$$

donde ha de verificarse $\Delta S_0 = 0$ para que $|\langle \gamma J || T_X || \gamma_0 J_0 \rangle|^2 \neq 0$.

Utilizando el álgebra de Racah se llega a

$$|\langle \gamma J || T_X || \gamma_0 J_0 \rangle|^2 = N |G(L_0 S_0, L S_0)|^2 (2J_0+1)(2J+1) \left\{ \begin{matrix} L_0 J_0 S_0 \\ J L X \end{matrix} \right\}^2 \cdot (2L_0 + 1) \cdot (2L + 1) \left\{ \begin{matrix} 1_0 L_0 L_c \\ L 1 X \end{matrix} \right\}^2 |\langle 1_0 || C^X || 1 \rangle|^2 \left(\int R_{\gamma_0} R_{\sigma} J_X(Kr) r^2 dr \right)^2 \quad \text{IV.17}$$

donde N es el número de electrones de la capa a la que pertenece el electrón que sufre la transición.

G es el coeficiente genealógico y

$$\left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ d & e & f \end{matrix} \right\} \text{ son los símbolos } 6_j.$$

El número de términos X está limitado puesto que para que se cumplan las relaciones triangulares de los símbolos 6_j , debe cumplirse que

$$\left. \begin{aligned} L_0 + L &\geq X \geq |L_0 - L| \\ 1_0 + 1 &\geq X \geq |1_0 - 1| \\ J_0 + J &\geq X \geq |J_0 - J| \end{aligned} \right\} \quad \text{(IV.18)}$$

En la ecuación (IV.17) se encuentran ya separadas la parte angular y la parte radial. Esta última es la que se encuentra dentro de la integral.

Con este desarrollo, partiendo de la teoría de perturbación se ha llegado a una expresión en función de los coeficientes de Racah y de una integral radial, que permite obtener el valor de la sección eficaz total, conociendo los números cuánticos de los niveles que intervienen en la transición y las funciones radiales de los correspondientes orbitales. Es decir mediante (IV.16) y (IV.17) se tiene

$$\sigma = \frac{8\pi}{k_0^2 a_0^2} \cdot \sum_X (2X + 1) \cdot N \cdot |G(L_0 S_0, L S_0)|^2 \cdot (2J + 1) \left\{ \begin{matrix} L_0 J_0 S_0 \\ J L X \end{matrix} \right\}^2 \cdot (2L_0 + 1) \cdot (2L + 1) \cdot \left\{ \begin{matrix} L_0 L_0 L_c \\ L 1 X \end{matrix} \right\}^2 \cdot |1_0||C^X||1\rangle|^2 \cdot \int_{K_{\min.}}^{K_{\max.}} \left(\int_0^\infty R_{Y_0} R_{Y_X} J_X(Kr) r^2 dr \right)^2 \frac{dK}{K^3} \quad (IV.19)$$

IV.3.2.- Aplicación al caso del Ne .

Las secciones eficaces de excitación que hemos determinado experimentalmente son las de los niveles $3p' |1/2|_0$ y el $4p' |1/2|_0$. Indicábamos en el capítulo I que la sección eficaz del nivel i es la probabilidad de transición por impacto desde el nivel fundamental (puesto que tratamos con átomos neutros) al nivel i . El estado fundamental del Ne en el acoplamiento L-S viene definido por el término 1S_0 .

Los niveles excitados $3p' |1/2|_0$ y $4p' |1/2|_0$ en la notación de Racah $^{(JK)}$, deben desarrollarse en funciones de onda Russell-Saunders un cambio de base.

Los niveles $np' |1/2|_0$ pertenecen a la configuración $2p^5np$.
Los niveles posibles en L-S son :

$$\begin{array}{ll} {}^3D_{3,2,1} & {}^1D_2 \\ {}^3P_{2,1,0} & {}^1P_1 \\ {}^3S_1 & {}^1S_0 \end{array}$$

El nivel $np' |1/2|_0$ será una combinación lineal de los niveles con igual J , es decir:

$$np |1/2|_0 = \alpha {}^3P_0 + \beta {}^1S_0$$

Los coeficientes nos darán las fórmulas del cambio de base, que vienen ya calculadas en (56) cuyos valores vienen dados por

$$\alpha = \sqrt{2/3} \quad y \quad \beta = 1/\sqrt{3}$$

luego

$$np |1/2|_0 = \sqrt{2/3} {}^3P_0 + \frac{1}{\sqrt{3}} {}^1S_0$$

Como el estado fundamental es 1S_0 y hemos visto que en acoplamiento Russell-Saunders $\Delta s = 0$ para que el elemento de matriz $\langle \gamma J || T_x || \gamma_0 J_0 \rangle$ no se anule, resulta

$$| \langle \sqrt{2/3} {}^3P_0 + \frac{1}{\sqrt{3}} {}^1S_0 || T_x || {}^1S_0 \rangle |^2 = \frac{1}{3} | \langle (2p^5np) {}^1S_0 || T_x || (2p^6) {}^1S_0 \rangle |^2$$

(IV.20)

Sustituyendo los valores correspondientes en la expresión (IV.19) para estas transiciones, resulta en este caso

$$\begin{array}{l} x = 0 \\ N = 6 \\ G = 1 \end{array}$$

Si

$$x = 0, \quad |(1_0||c^0||1)|^2 = (21 + 1) (\delta_{11})^2 = 3 \cdot 1 = 1$$

para los símbolos $6j$ hay que tener en cuenta que

$$\begin{aligned} J_0 &= 0 ; & s_0 &= 1/2 ; & S &= 0 \\ L_0 &= 0 ; & L_c &= 1 ; & s &= 1/2 \\ S_0 &= 0 ; & J &= 0 ; & l &= 1 \\ l_0 &= 1 ; & L &= 0 ; \end{aligned}$$

y los símbolos toman el valor

$$\begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix}^2 = 1$$

$$\begin{Bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{Bmatrix}^2 = 1/3$$

En el cálculo de la integral radial

$$\int_0^\infty Rr_0 R_r J_0(Kr) r^2 dr$$

no podemos utilizar la aproximación de Coulomb (56) ya que esta desprecia la parte en que $r \rightarrow 0$ y precisamente en este caso debido a la presencia de $J_0(Kr) = \frac{\sin Kr}{Kr}$ la mayor contribución se tiene para las regiones en que r es del orden de a_0 .

Se han realizado en este caso dos cálculos diferentes de las partes radiales de los orbitales que intervienen en la transición. La primera utilizando el potencial local autoconsistente de Sánchez del Río (57) y la segunda el potencial paramétrico semi-empírico de Ganas-Green (58).

El potencial local autoconsistente viene expresado de la forma:

$$V(r) = -\frac{1}{r} \left\{ \left(N - \frac{1}{2} \right) \left[A \exp(-a_1 r) + (1-A) \exp(-a_2 r) \right] + Z - N + 1 \right\} \quad (\text{IV.21})$$

Cuyos parámetros A , a_1 y a_2 tomados directamente de ref. (67) son en este caso

$$\begin{aligned} A &= 0.933 \\ a_1 &= 2.353 \text{ (} a_0^{-1} \text{)} \\ a_2 &= 14.871 \text{ (} a_0^{-1} \text{)} \end{aligned}$$

Como $N = Z$ en el caso presente

$$V(r) = -\frac{1}{r} \left\{ \left(Z - \frac{1}{2} \right) \left[A \exp(-a_1 r) + (1-A) \exp(-a_2 r) \right] + 1 \right\} \quad (\text{IV.22})$$

Aplicando este potencial a la ecuación de Schrodinger con

$$R_{n1}(r) = \frac{P_{n1}(r)}{r}$$

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 P_{n1}}{dr^2} + \left[E_{n1} - \left(V(r) + \frac{1(1+1)}{2r^2} \right) \right] P_{n1} = 0$$

con la relación de normalización

$$\int_0^\infty P_{n1} \cdot P_{n'1} \cdot dr = \delta_{nn'} \delta_{11}$$

También se utilizó con el fin de obtener resultados comparativos el potencial paramétrico de Ganas-Green, que viene expresado de la forma

$$V(r) = \frac{2}{r} \left| (Z-1) \cdot \left| H(e^{r/d} - 1) + 1 \right|^{-1} + 1 \right|$$

siendo

$$\begin{aligned} d &= 0.715 \\ H &= 2.219 \end{aligned}$$

estos valores se dan considerando los estados excitados incluyen do el fundamental, pero sin considerar los estados interiores. Para ambos potenciales se utilizaron como energías E_{n1} las que aparecen en las tablas de C. Moore (59) promediadas para todos los niveles que provienen del mismo término padre, es decir

$$E_{n1} = \frac{\sum_i (2J_i + 1) E_{n1} l_i}{\sum_i (2J_i + 1)}$$

Así por ejemplo, para los niveles $np' |1/2|_0$ contribuyen las energías de los niveles que tienen $L_c = 1$, $S_c = 1/2$ y $J_c = 1/2$ que son:

$$np' |3/2|_2$$

$$np' |3/2|_1$$

$$np' |1/2|_1$$

$$np' |1/2|_0$$

Para la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger se utiliza el método de Númerov (57). Dada la ec.

$$\frac{d^2 \phi}{dr^2} = f(r) \phi(r) ,$$

$$\phi_{n+1} = \frac{2\phi_n - \phi_{n-1} + (h^2/12)(f_{n-1}\phi_{n-1} + 10f_n\phi_n)}{1 + f_{n+1}(h^2/12)}$$

donde

$$h = r_{n+1} - r_n = r_n - r_{n-1} .$$

En nuestro caso la ecuación toma la forma

$$\frac{d^2 P_{n1}}{dr^2} = \left[\frac{1(1+1)}{r^2} - 2E_{n1} + 2V(r) \right] P_{n1}$$

en donde hemos hecho la transformación

$$\phi = P_{n1}$$

$$f(r) = \frac{1(1+1)}{r^2} - 2E_{n1} + 2V(r)$$

Para su resolución se ha utilizado un programa en BASIC realizado expresamente para este trabajo.

Para el cálculo de las funciones hemos utilizado valores de la energía del nivel próximos a la energía experimental. Los resultados obtenidos son:

Energías	2p(fundamental)	3p	4p
Valor experimental	-0.796	-0.108	-0.049967
Potencial de Ganas-Green	-0.7945	-0.1078	-0.049967
Potencial local	-0.686	-0.104	-0.048930

Las partes radiales de los orbitales así obtenidos se pueden considerar prácticamente nulas para los niveles 2p a distancias $r = 5a_0$, para los 3p a $20a_0$ y para los 4p a $35a_0$.

Las funciones de onda $P_{2p}(r)$, $P_{3p}(r)$ y $P_{4p}(r)$ fueron convenientemente normalizadas y en las Fig. (52), (53) y (54) se encuentran representadas.

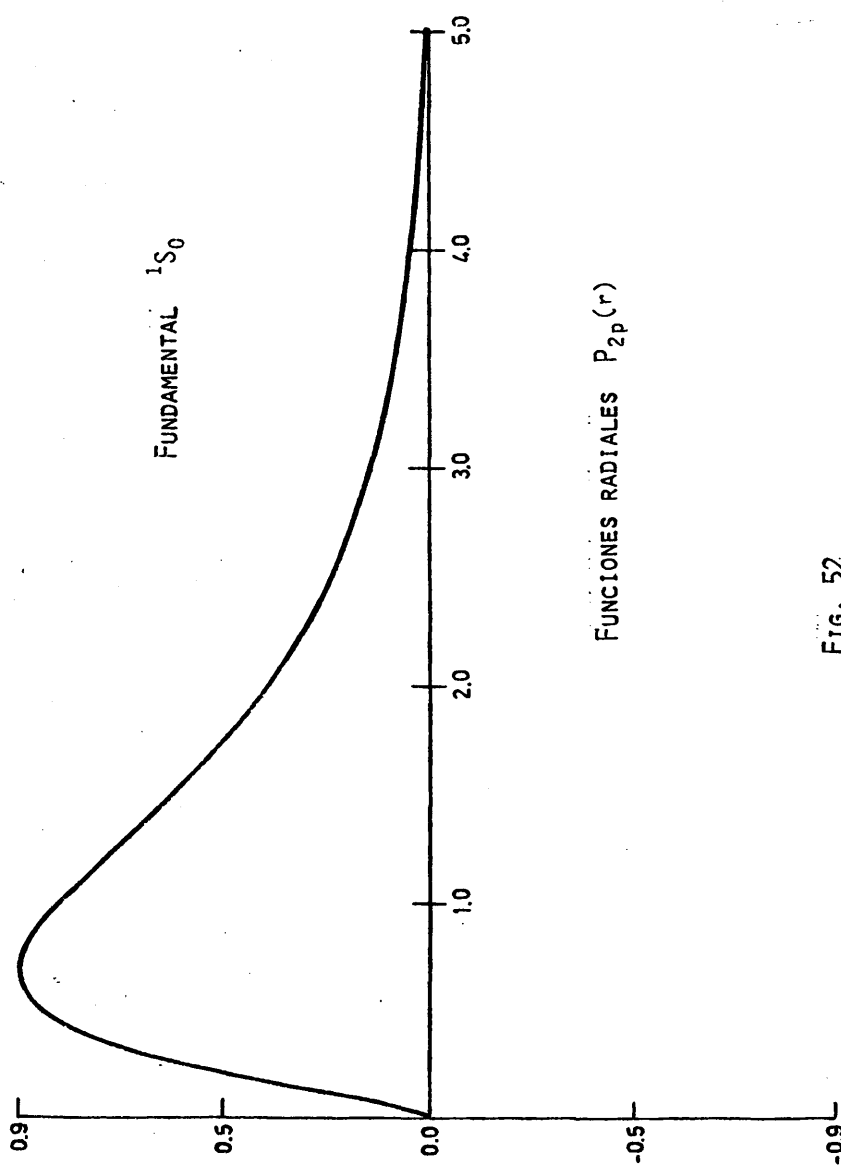
Posteriormente se realizó otro programa para el cálculo de la integral

$$R(K) = \int_{K_{\min.}}^{K_{\max.}} P_{n_0} P_{n1} \frac{\sin Kr}{Kr} dk$$

Las funciones subintegrales se muestran representadas en las Figs. (55) y (56).

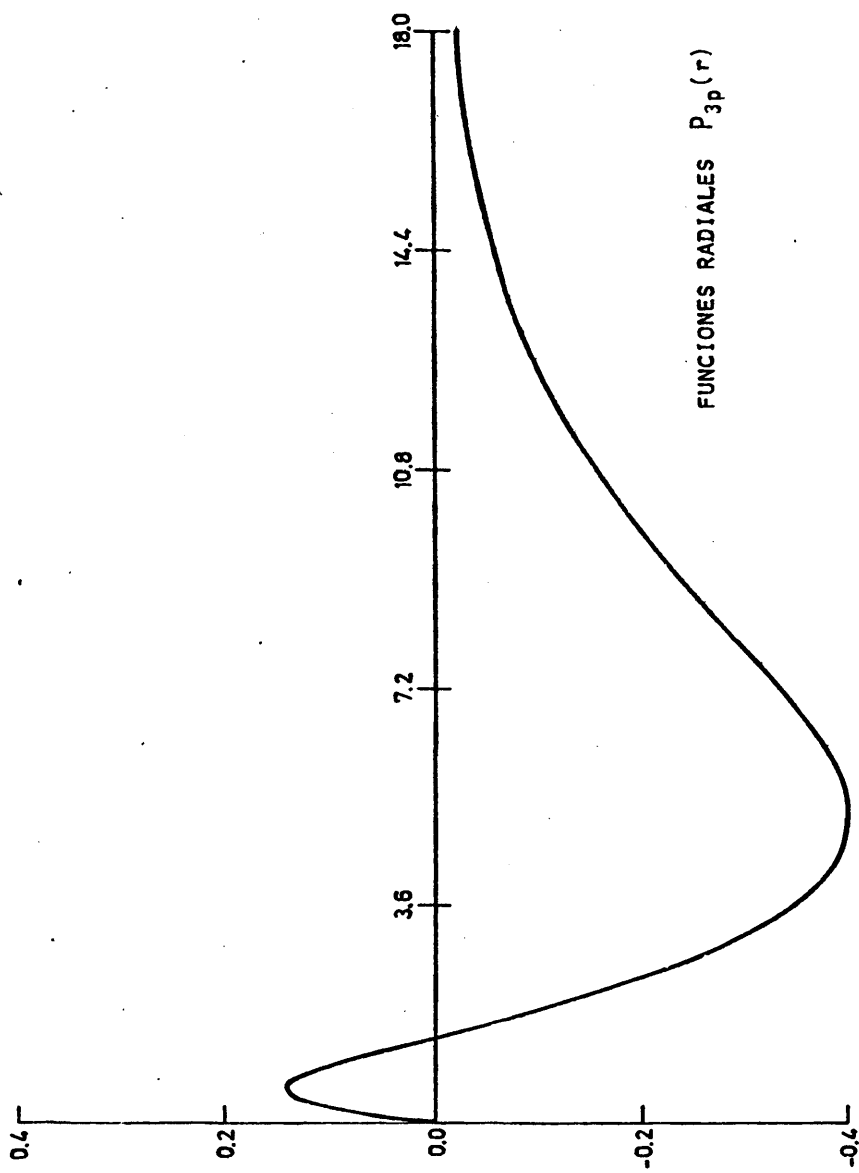
$$\text{Para la transición } 2p \rightarrow 3p \quad K_{\min} = 0.27032 a_0^{-1}$$

$$K_{\max} = 5.14816 a_0^{-1}$$



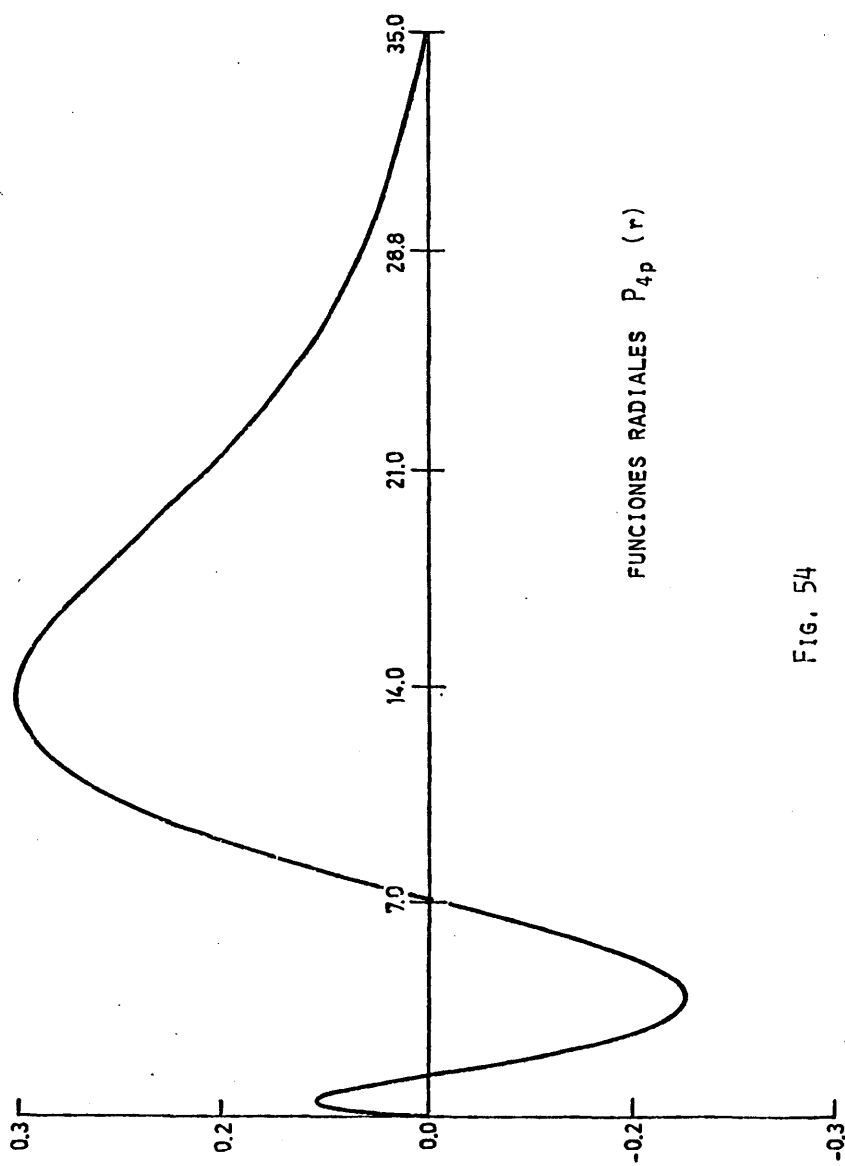
FUNCIONES RADIALES $P_{2p}(r)$

Fig. 52



FUNCIONES RADIALES $P_{3p}(r)$

FIG. 53



FUNCIONES RADIALES $P_{4p}(r)$

Fig. 54

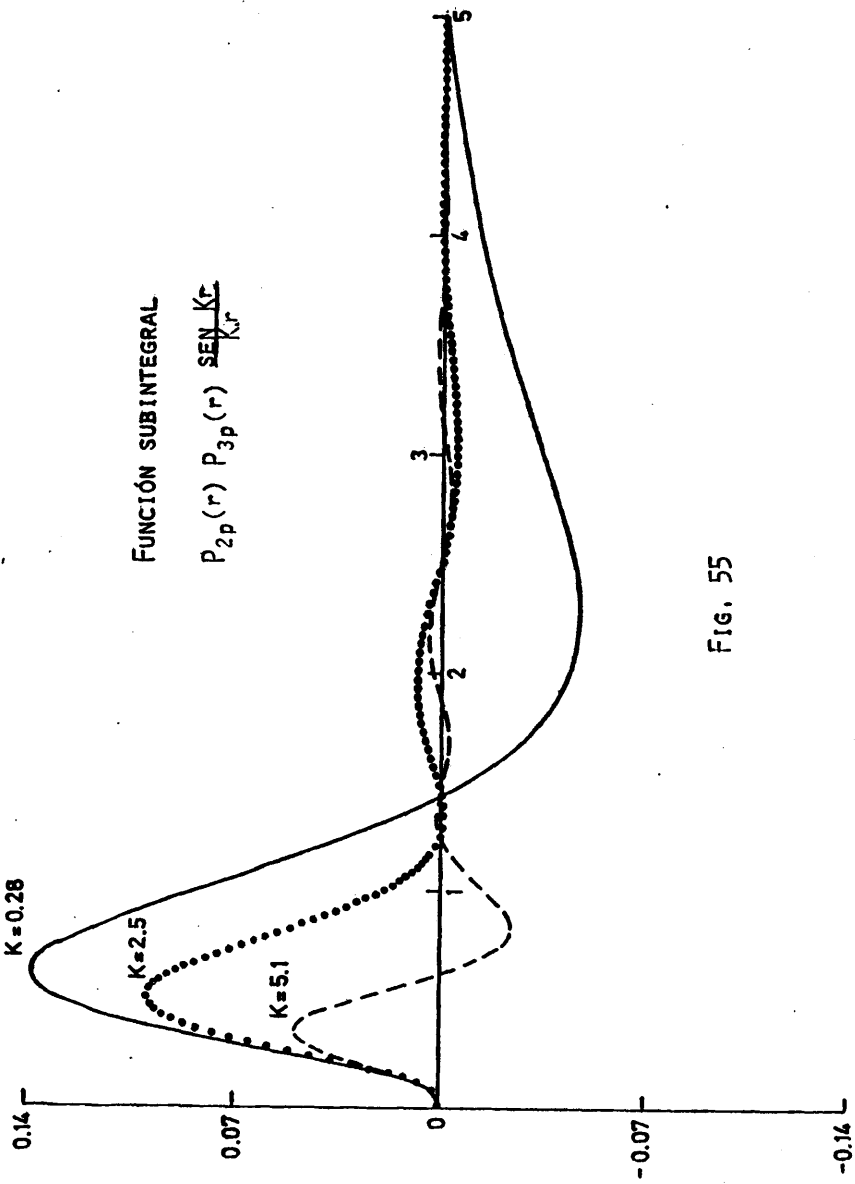


Fig. 55

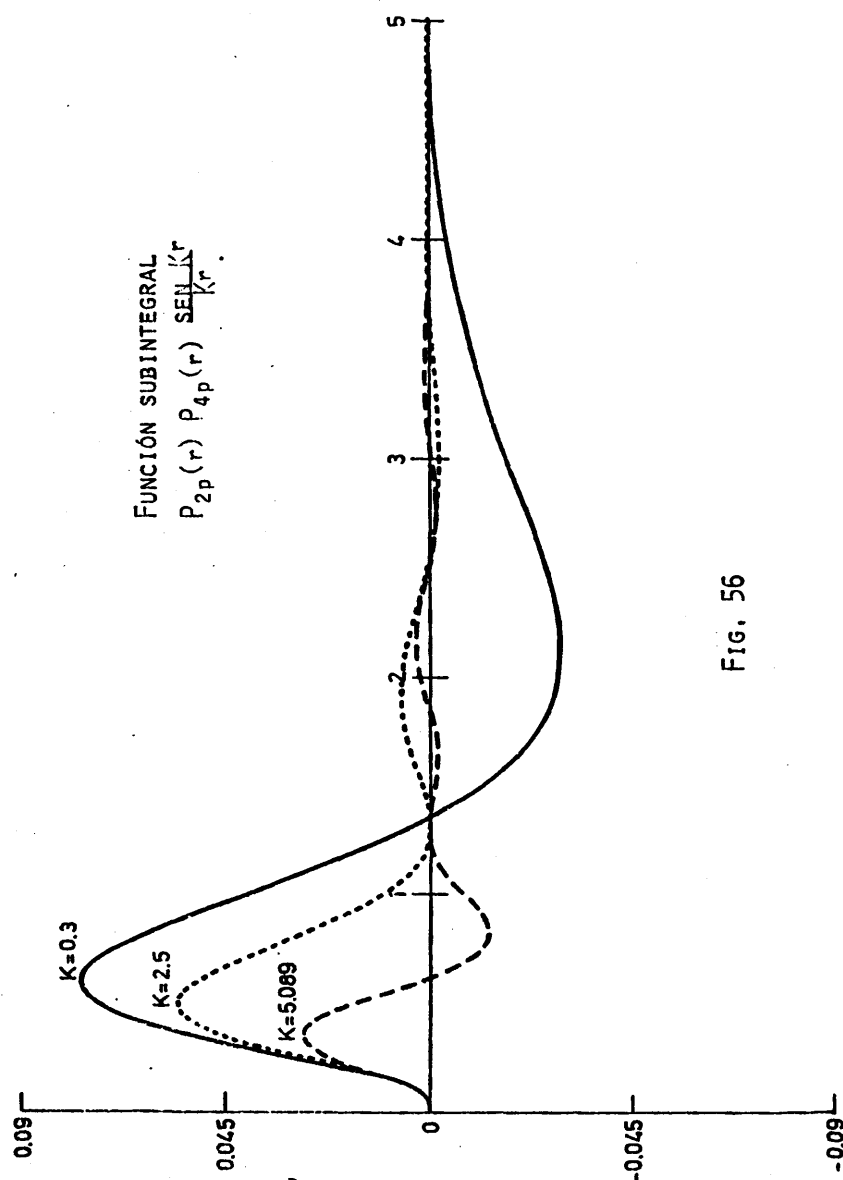


Fig. 56

$$\begin{aligned} \text{y para la transición } 2p \rightarrow 4p \quad K_{\text{mín.}} &= 0.29371 \, a_0^{-1} \\ K_{\text{máx.}} &= 5.089394 \, a_0^{-1} \end{aligned}$$

Las funciones $R^2(K)$ para las transiciones en estudio se representan en las Fig. (57) y (58).

Resultados obtenidos:

En la tabla X se muestran los resultados obtenidos para ambas transiciones con los dos potenciales utilizados. Los resultados de Sharpton y col. (51) que también hicieron un cálculo teórico utilizando la aproximación de Born y orbitales obtenidos mediante el método de Hartree-Fock-Slater, se acompañan en la tabla para comparación. Los resultados mostrados en la tabla X concuerdan bien con los experimentales ($202 \pm 20 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ para el nivel $3p' |1/2|_0$ y $43 \pm 4 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ para el nivel $4p' |1/2|_0$) dentro de la presión de las medidas y de la aproximación de Born. No obstante, se puede observar la gran importancia que tiene la obtención de las partes radiales de los orbitales en este tipo de cálculos. Los valores experimentales de la ref. (51) ($160 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ y $64 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ respectivamente) presentan un acuerdo razonable con los valores teóricos, aunque éste es algo peor para el nivel $3p' |1/2|_0$.

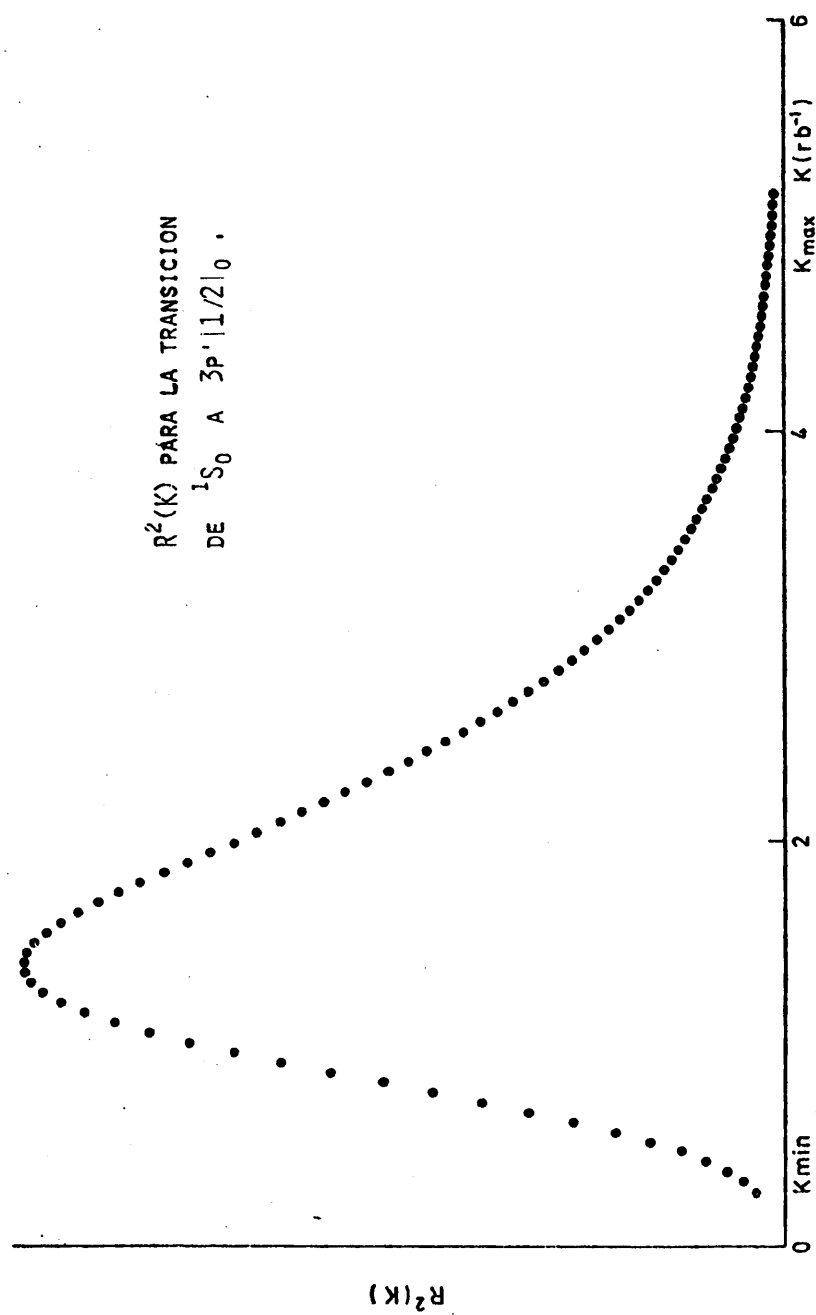
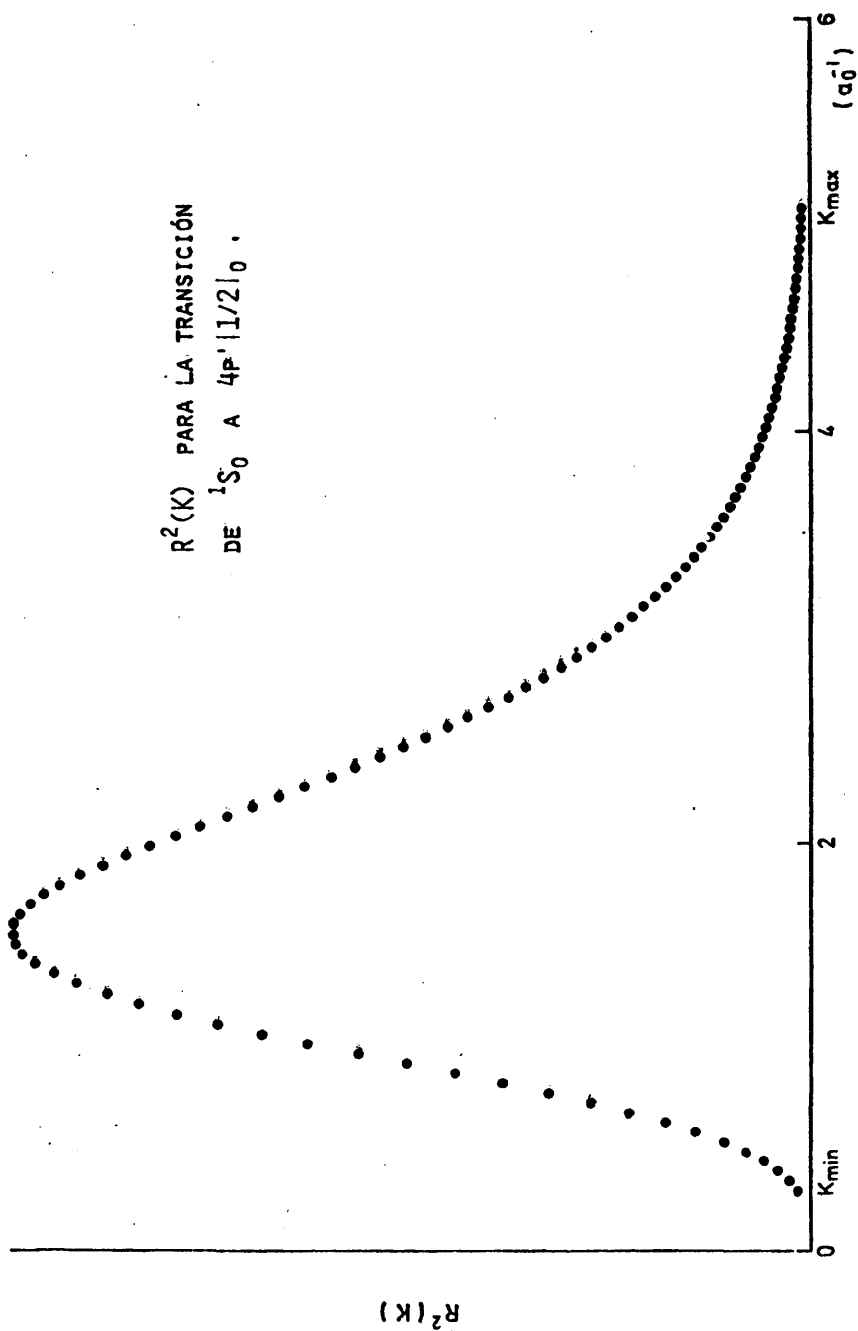


Fig. 57

$R^2(K)$ PARA LA TRANSICIÓN
DE $1S_0$ A $4P'1/2|_0$.



152.

FIG. 58

TABLA X

Resultados teóricos de las secciones eficaces de
excitación de niveles del Ne a 100 eV .

($\times 10^{-20}$ cm²)

	$3p' 1/2 _0$	$4p' 1/2 _0$
Potencial local	220	52.7
Pot. Ganas-Green	195.7	38.7
Sharpton y col. (51)	330	80

CONCLUSIONES

- 1°) Se ha desarrollado un método de medida de secciones eficaces de excitación por impacto de electrones válido tanto para niveles atómicos como moleculares. Para ello se han desarrollado una serie de técnicas y métodos de corrección utilizando análisis temporal que permiten obtener valores absolutos de las correspondientes secciones eficaces, con un error del 10%.
- 2°) Se ha utilizado el método óptico para la determinación de la sección eficaz de excitación. En trabajos de otros autores para la calibración de la eficiencia óptica, se utiliza generalmente una lámpara de tungsteno calibrada como patrón. Para evitar una serie de dificultades experimentales y errores que este método conlleva, el utilizado en este trabajo consiste en usar como patrón la intensidad luminosa producida en la transición ($5^1s \rightarrow 2^1p$) (4.437 \AA) del Helio, que se compara con la intensidad de la transición que parte de la línea o banda en estudio.
- 3°) A partir del espectro obtenido en la excitación de las moléculas del gas por impacto de electrones, se han medido las intensidades relativas de treinta bandas del Segundo Sistema Positivo ($C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$) de la molécula N_2 y de seis bandas del Primer Sistema Negativo ($B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$) de la molécula de N_2^+ .
- 4°) Se han hallado las razones de ramificación de los niveles vibracionales del estado electrónico $C^3\Pi_u$ en N_2 y del $B^2\Sigma_u^+$ en N_2^+ . Al mismo tiempo se han calculado teóricamente dichas razones de ramificación a partir de los factores de Franck-Con

don. El estudio comparativo de ambos resultados muestra buen acuerdo entre los valores experimentales y los teóricos, por lo que puede deducirse que el momento de transición electrónica es aproximadamente independiente de la distancia internuclear para las transiciones estudiadas.

- 5°) Se ha medido la dependencia de la sección eficaz con la energía de los electrones (función de excitación) de las bandas de la molécula neutra N_2 y de las bandas de las moléculas ionizada N_2^+ desde el umbral hasta 400 eV, con una precisión superior al 5%. La función de excitación de los niveles del estado $C^3\Pi_u$ de N_2 muestra un máximo agudo para una energía de 20 eV decayendo después rápidamente al aumentar la energía de los electrones. Por el contrario la función de excitación de los niveles del estado $B^2\Sigma_u^+$ del N_2^+ muestra un amplio máximo centrado en 100 eV y una pendiente suave de decrecimiento.
- 6°) Se han medido igualmente las funciones de excitación de tres líneas de niveles singletes (4^1S , 5^1S y 3^1P) y dos de tripletes (4^3S y 3^3P) del átomo de He, encontrándose en el caso de los singletes resultados previsibles por la teoría en cuanto a la forma y pendiente. En el caso de los tripletes, una vez efectuadas las correcciones por cascadas radiativas se observa una función de excitación que está de acuerdo con la teoría de Ochkur. La precisión en la determinación de la función de excitación es del 5% en el caso de los niveles singletes y del 10% en el caso de los niveles tripletes.
- 7°) Se ha medido las funciones de excitación de los niveles $3p' | 1/2 |_0$ y $4p' | 1/2 |_1$ del Ne para energías de los electrones desde el umbral hasta 400 eV. La forma de la función de excitación es la misma para ambos niveles. Estos niveles han sido elegidos por presentar una pequeña contribución por cascadas radiativas. La precisión en la medida es del 5%.

- 8°) Se han medido las secciones eficaces de excitación en el máximo de veinticuatro transiciones vibracionales del Segundo Sistema Positivo del N_2 .

Igualmente se han medido las secciones eficaces de excitación de seis transiciones vibracionales del Primer Sistema Negativo del N_2^+ .

- 9°) Se han medido las secciones eficaces de excitación máxima de los niveles vibracionales $v' = 0$ y 1 del estado $B^2\Sigma_u^+$ del N_2^+ .

- 10°) De las medidas realizadas en N_2 y N_2^+ se deduce que la banda de 4278 \AA que corresponde a la transición $(0-1)$ del sistema $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$ es muy apropiada para utilizarla como patrón. Dadas sus características de intensidad, reproducibilidad y ausencia de cascadas y otros procesos de población secundarios.

- 11°) Se han medido las secciones eficaces de excitación de las transiciones $4^1S \rightarrow 2^1P$ (5.048 \AA), $4^3S \rightarrow 2^3P$ (4.713 \AA) $3^3P \rightarrow 2^3S$ (3.889 \AA) del He. A partir del conocimiento de las razones de ramificación se han deducido las secciones eficaces de excitación de los niveles 4^1S , 4^3S y 3^3P del He a 100 eV y a partir de las funciones de excitación se han determinado los valores de las secciones eficaces en el máximo.

- 12°) Se ha utilizado un dispositivo para estudiar el análisis temporal de la desexcitación de los niveles y comprobar si éstos presentan población desde niveles superiores (cascadas). Se han determinado las cascadas de los estados triplete del He casi como de los niveles del Ne. En el caso de los tripletes del He, el factor correspondiente a la población por cascada ha servido para efectuar la corrección del valor obtenido en la función de excitación, proporcionando el valor real de la sección eficaz de excitación. Estas correcciones son del 18%

en el nivel 4^3S y del 30% en el nivel 3^3P . En el caso del nivel $3p'|1/2|_0$ del Ne la corrección fue del 4% y en el nivel $4p'|1/2|_0$ fue del 6%.

Estimamos que el método de análisis temporal es el único que puede proporcionar resultados fiables para estas correcciones.

13°) Se han medido las secciones eficaces de excitación de los niveles $3p'|1/2|_0$ y $4p'|1/2|_0$ del Ne en su valor máximo y a 100 y 200 eV con un error del 10%.

14°) Finalmente se han calculado teóricamente las secciones eficaces de excitación por la aproximación de Born. Se han utilizado dos potenciales diferentes para obtener la parte radial de los orbitales. Los resultados teóricos y experimentales concuerdan dentro del 10% en el caso del nivel $3p'|1/2|_0$ y dentro del 20% para el nivel $4p'|1/2|_0$.

Los resultados del presente trabajo abren nuevas perspectivas en el estudio de los gases nobles. Lo que nos permite afirmar que es posible realizar cálculos teóricos y determinaciones experimentales de las secciones eficaces de excitación de los átomos con configuraciones excitadas p^5n1 , con resultados satisfactorios, para valores de la energía de los electrones de 100 eV o superiores.

BIBLIOGRAFIA

1. B.L.MOISEWITZCH and S.J.SMITH, *Rev.of Mod.Phys.* 40, 2 (1968) p. 238.
2. G.J.SCHULZ and PHILBRICK, *Phys.Rev.Lett.* 13 (1964), p. 477.
3. D.W.O.HEDDLE and R.G.W.KEESING, *Measurements of Electron Excitation Functions*, Advances in Atomic and Molecular Physics. Academic Press (New York) 1968.
4. H.S.W.MASSEY, E.H.S.BURHOP and H.B.GILBODY, *Electronic and Ionic Impact Phenomena*, I.Collisions of Electrons with Atoms Oxford (London, 1969).
5. K.L.BELL, D.J.KENNEDY and A.E.KINGSTON, *J.Phys.*, B-2, 2 (1969) p. 26.
6. K.L.BELL, D.J.KENNEDY and A.E.KINGSTON, *J.Phys.*, B-2, 1 (1968) p. 204.
7. I.SCOTT and M.R.C.McDOWELL, *J.Phys.*, B-9 (1975) p. 2369.
8. J.GORDON and R.BLAIR, *Phys.Rev.*, 11 (1975) p. 1899.
9. M.R.MOUSTAFA MOUSSA, F.J.de HEER, and J.SCHUTTEN, *Physica*, 40 (1969) p. 517.
10. A.F.I.VAN RAAN, J.P.de JONGH, J.VAN ECK and H.G.H.HEIDEMAN, *Physica*, 53 (1971), p. 45.
11. A.H.GABRIEL and D.W.O.HEDDLE, *Proc.Roy.Soc.* A258 (1960), p. 124.
12. A.V.PHELPS, *Phys.Rev.*, 110 (1958) p. 1362.
13. J.GORDON SHOWALTER and R.B.KAY, *Ver ref.* (8).
14. V.I.OCHKUR and V.F.BRATTSEV, *Optics and Spectrosc.* 19 (1965)

- p. 274.
15. F.ARQUEROS, *Estudio de algunos estados electrónicos del CO⁺*.
(Tesis Doctoral, Universidad Complutense, 1980).
 16. St.JOHN and R.G.FOWLER, *Phys.Rev.*, 122 (1961), p. 1813.
 17. D.W.O.HEDDLE, *Proc.Phys.Soc.(London)*, 90 (1967), p. 81.
 18. C.SMIT, H.G.M.HEIDEMAN and J.A.SMIT, *Physica*, 29 (1963), p. 245.
 19. V.FONSECA, Tesis Doctoral, Universidad Complutense (1978).
 20. P.MARTIN, Tesis Doctoral, Universidad Complutense (1976).
 21. R.W.NICHOLLS, *Journal of Research (N.B.S.)*, 65A (1961), p. 151.
 22. H.NISHIMURA, *J.of de Phys.Soc.of Japan*, 24, 1 (1968) p. 130.
 23. D.R.BATES, *Montly Not.Roy.Astron.Soc.*, 112 (1952) p. 614.
 24. R.W.NICHOLLS, *Canad.J.Phys.*, 43 (1965) p. 1390.
 25. D.J.BURNS, F.R.SIMPSON and J.W.McCONKEY, *J.Phys.* B-2, 2 (1969) p. 52.
 26. D.JOBE, F.A.SHARPTON and R.M.ST.JOHN, *J.Opt.Soc.of Am.*, 57 (1967) p. 106.
 27. F.ARQUERO, C.HERRAN y J.CAMPOS, *Anales de Física*, 73 (1976), p. 124.
 28. D.T.STEWART and E.GABATHULER, *Proc.Phys.Soc.(London)* 72 (1958) p. 287.
 29. V.S.KUBENICH and J.P.ZAPESCHNYI, *Proc. 5° Int.Congr.on Atomic Collissions. Leningrad.* (1967) p. 570.
 30. N.STANTON and R.M.ST.JOHN, *J.of Opt.Soc.Am.* 59, 3 (1969) p. 252.
 31. J.F.M.AARTS, F.J.de HEER and D.A.KROOM, *Physica*, 49, (1968) p. 197.

32. J.W.McCONKEY and LATIMEZ, *Proc.Phys.Soc.* 86 (1965), p. 463.
33. WALLACE and R.W.NICHOLLS, *J.Atmosf.Tech.Phys.*, 1 (1955), p. 101.
34. PHYLPOD and R.H.HUGHES, *Phys.Rev.*, 133 (1964), p. A-107.
35. B.N.SRIVASTAVA y I.M.MIRZA, *Phys.Rev.* 176 (1968), p. 137.
36. D.W.O.HEDDLE y R.G.W.KEESING, *Proc.Roy.Soc.*, A-299 (1967), p. 212.
37. B.N.SRIVASTAVA and I.M.MIRZA, *Phys.Rev.*, 168, 1 (1967), p. 86.
38. D.T.STEWART, *Proc.Phys.Soc.(London)*, A-69 (1956), p. 437.
39. W.L.BORST and E.C.ZIPF, *Phys.Rev.*, 1A, 3 (1970), p. 834.
40. J.CAMPOS, *Anales de Física*, 69, 7-9 (1973), p. 291.
41. R.B.KAY and J.G.SHOWALTER, *Phys.Rev.*, A-3, 6 (1971), p. 1998.
42. R.H.McFARLAND and E.A.SOLTYSIK, *Phys.Rev.*, 127 (1962), p. 2090.
43. R.M.ST.JOHN, F.L.MILLER and CHUN C.LIN, *Phys.Rev.*, 134 (1964) A888.
44. D. WEAVER and R.H.HUGHES, *Phys.Rev.* 132 (1963), p. 710.
45. D.JOBE and R.M.ST.JOHN, *Phys.Rev.*, 164 (1967), p. 1.
46. V.E.YAKHONTOVA, *Atomic Energy Res.Establ.* 951, Harwell, Berkshire-England.
47. D.T.STEWART and H.GABATHULER, *Proc.Phys.Soc.(London)*, 74 (1959), p. 473.
48. J.H.LEES, *Proc.Roy.Soc.*, A-137 (1932), 173.
49. W.HANLE, *Z.Physik*, 65 (1930), p. 512.
50. I.P.ZAPESOCHNYI and P.V.FELTSAN, *Bull.Acad.Sci.USSR, Phys.Serv.*, 27 (1963), p. 1015.

51. F.A.SHARPTON, R.M.ST.JOHN, CHUN C.LIN and F.E.FAJEN, *Phys.Rev.* A-2, 4 (1970), p. 1305.
52. O.HERRMANN, *Ann.Physik*, 25 (1936), p. 143.
53. A.G.GAYDON and R.W.B.PEARSE, *The Identification of Molecular Spectra*, Chapman and Hall (London), 1965.
54. J.W.McCONKEY and J.M.WOOLSEY, *Proc.VIth Int.Conf.Electr.At.Coll.* (1969), Cambridge.
55. D.W.O.HEDDLE and C.B.LUCAS, *Proc.Roy.Soc.*, A-271 (1963), p. 129.
56. I.I.SOBEL'MAN, *An Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Pergamon Press (1972).
57. C. SANCHEZ DEL RIO, *Introducción a la teoría del átomo*. Alhambra (1977).
58. P.S.GANAS and A.E.S.GREEN, *Phys.Rev.*, A-4, 1 (1971), p. 182.
59. C.MOORE, *Atomic Energy Levels*, Vol. 1, N.B.S. (1952).

Reunido el Tribunal que suscribe
 en el día de la fecha acordó cali-
 ficar la presente Tesis Doctoral
 con la censura de:

Subsistente con la censura

Madrid, 18 de Diciembre 1981

AQ

Ceballos, del Rio



BIBLIOTECA

[Signature]

M. = [Signature]